



Casa abierta al tiempo

Universidad Autónoma Metropolitana

Azcapotzalco

POSGRADO EN INGENIERÍA DE PROCESOS

CONTROL ROBUSTO DE UN REACTOR
CONTINUO PARA LA PRODUCCIÓN DE
BIOBUTANOL

TESIS QUE PRESENTA

ERICKA TORRES QUINTANILLA

PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRO EN INGENIERÍA DE PROCESOS

ASESORES

DR. HÉCTOR FERNANDO PUEBLA NÚÑEZ

DR. RICARDO AGUILAR LÓPEZ

2017

El presente trabajo se realizó en la Universidad Autónoma Metropolitana en la División de Ciencias Básicas e Ingeniería, bajo la dirección del Dr. Héctor Fernando Puebla Núñez así como la supervisión del Dr. Ricardo Aguilar López del CINVESTAV. El trabajo se realizó bajo el apoyo del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT).

Agradecimientos

Siempre mi primer agradecimiento será a Dios, por tomar mi vida y llevarme por el camino que ha elegido para mi.

Gracias a la persona mas especial en mi vida, que llena de colores y sonrisas cada uno de mis dias, gracias interminables Edgar Olivos Santes.

Gracias a mi familia por el apoyo de siempre para realizarme como persona y profesionista.

Gracias a mis amigos de maestría que hacían los dias más ligeros, sin duda fuimos una generación única.

Gracias Dr. Puebla, es sin duda una de las personas más inteligentes, amables y sencillas que conozco, sin su experiencia y apoyo esto no sería posible.

Gracias a todos los maestros de la maestría, por compartirnos un granito de toda su sabiduría, todos los trabajos, tareas y desvelos valieron la pena.

Un agradecimiento especial al Conacyt por el apoyo para realizar mis estudios de maestría y mi estancia internacional, sin el apoyo de la beca y de mi asesor esto no sería posible.

Índice general

Agradecimientos	3
Resumen	10
1. Introducción	11
1.1. Motivación	11
1.2. Justificación	14
1.3. Control de bioprocesos	15
1.4. Hipótesis	18
1.5. Objetivos	18
1.5.1. Objetivo General	18
1.5.2. Objetivos Específicos	18
1.6. Estructura de la tesis	18
2. Marco Teórico	20
2.1. Butanol	20
2.2. Producción de butanol	21
2.2.1. Hidroformilación	21
2.2.2. Fermentación ABE	22

2.3. Bioreactores	24
2.4. Modelado fenomenológico de procesos	25
2.5. Modelado por identificación empírica	26
2.6. Incertidumbres de modelos matemáticos	27
2.7. Análisis matemático y numérico	27
2.7.1. Puntos de equilibrio	28
2.7.2. Estabilidad en un punto de equilibrio	28
2.7.3. Linealización de un modelo no-lineal	29
2.7.4. Función de transferencia	29
2.7.5. Simulaciones numéricas	31
2.8. Control de procesos	31
2.8.1. Definiciones	32
2.8.2. Pasos para el diseño de sistemas de control	33
2.8.3. Control clásico PID	33
2.8.4. Controlabilidad y observabilidad.	34
2.9. Estimadores de estados	35
2.10. Controlabilidad de sistemas no lineales	35
2.11. Control robusto por compensación de error de modelado.	36
3. Modelado y Análisis de la Producción de Butanol en un CSTR	39
3.1. Modelo matemático de la producción de butanol en un CSTR.	39
3.2. Análisis matemático	44
3.2.1. Puntos de equilibrio	45
3.2.2. Linealización	46

3.2.3. Estabilidad	47
3.3. Simulaciones numéricas	48
3.3.1. Programación	48
3.3.2. Simulación base	48
3.3.3. Efectos de cambios en D y X_{1in}	50
3.3.4. Identificación empírica	51
4. Control Robusto Basado en Compensación de Error de Modelado y Controlabilidad del Proceso.	55
4.1. Diseño de control robusto.	55
4.1.1. Problema de control.	55
4.1.2. Diseño del control con base a modelos de primer orden.	57
4.1.3. Implementación numérica del controlador.	59
4.2. Controlabilidad del proceso.	62
4.2.1. Análisis con base al modelo lineal.	62
4.3. Análisis numérico con base al modelo no-lineal.	65
5. Conclusiones y Trabajo futuro	68
5.1. Conclusiones	68
5.2. Trabajo futuro	69
Bibliografía	70

Índice de figuras

2.1. Principio de la hidroformilación	22
2.2. Ruta metabólica de la fermentación ABE	23
2.3. Esquema de control con retroalimentación y perturbaciones	32
3.1. Simulación del modelo matemático para la glucosa, biomasa y butanol con $S_g=45$, $D=0.01$ y $S_b=2$	49
3.2. Simulación del modelo matemático para el butirato, acetato, acetona y etanol con $S_g=45$, $D=0.01$ y $S_b=2$	49
3.3. Efecto de la tasa de dilución en la producción de butanol con $S_g=45$ y $S_b=2$. La tasa de dilución esta en $[h^{-1}]$	50
3.4. Efecto de la alimentación de glucosa en la producción de butanol con $S_b=2$ y $D=0.01$. La alimentación de la glucosa esta en $[g/L]$	51
3.5. Respuesta de paso escalón manipulando S_g	52
3.6. Respuesta de paso escalón manipulando D	53
4.1. Representación general de un sistema de control	56
4.2. Clasificación de las variables involucradas en el proceso	56
4.3. Diagrama de control robusto para controlar la producción de butanol en un fermentador ABE manipulando la tasa de dilución o la glucosa alimentada. Simulink, Matlab,	59

4.4. Simulación del control de la producción de butanol manipulando la Sga en el modelo	60
4.5. Simulación del control de la producción de butanol manipulando la D en el modelo	61
4.6. Comparación del control por compensación de error de modelado y un control PI.	62
4.7. Derivadas de los estados no controlados manipulando Sga	66
4.8. Derivadas de los estados no controlados manipulando D	66

Índice de cuadros

1.1. Características de diferentes biocombustibles.	12
3.1. Parámetros utilizados en la simulación del caso de estudio. Las constantes de inhibición y de afinidad tienen unidades de [g/L], la constante de muerte está en [h-1] y las velocidades específicas de producción en [h-1].	45

Resumen

En años recientes ha surgido un interés renovado en la producción comercial de biocombustibles. El biobutanol es un biocombustible que es atractivo por sus propiedades de usarse sin grandes modificaciones como sustituto de la gasolina y generar una menor emisión de contaminantes. Una limitación de los biocombustibles es su alto costo de producción, lo cual se puede reducir al usar procesos continuos y que operen en forma adecuada. En este trabajo se presenta el diseño de un esquema de control robusto para la producción de biobutanol por medio de la fermentación ABE en un reactor continuo de tanque agitado. El proceso se describe por un conjunto de siete ecuaciones diferenciales ordinarias no-lineales que describen la dinámica de las variables principales de operación (Glucosa, Biomasa, Biobutanol, Butirato, Acetato, Acetona, Etanol). Con base a modelos que se obtienen por identificación empírica, se proponen esquemas de control que compensan incertidumbres del modelo (reducción y simplificación del modelo). El control resultante es simple y muestra buenas propiedades de robustez bajo diferentes escenarios. Debido a la naturaleza de los bioprocesos, se estudia además las propiedades de controlabilidad en forma numérica en diferentes regiones de operación.

Capítulo 1

Introducción

Este capítulo presenta la motivación del trabajo de tesis sobre el diseño de control robusto en la producción de biobutanol. Con base al problema identificado se proporciona el estado del arte. Posteriormente se establecen la hipótesis y los objetivos de este trabajo. Finalmente se presenta la estructura de la tesis.

1.1. Motivación

El crecimiento desmedido del consumo de energía y su necesidad de aumento, con lleva a una investigación exhaustiva sobre el uso óptimo de la energía.

Es por eso que en los últimos años ha resurgido un interés especial en los recursos energéticos, principalmente en la producción de biocombustibles para combatir la crisis energética con la que nos presentamos actualmente [34].

El 80 % de la energía utilizada en el mundo proviene de combustibles fósiles, los cuales debido a su naturaleza, se estan acabando. Es por eso que la búsqueda de energías renovables es de suma importancia debido a la presente escasez que tenemos de petróleo, gas natural y otras energías fósiles [19].

Debido a esto, numerosas investigaciones están enfocadas en el desarrollo de energías alternas o renovables como sustitutos de combustibles que se obtienen de fuentes no renovables, es decir, combustibles que sean más fáciles y rápidos de producir y que a su vez dañen menos al medio ambiente [7].

Hoy en día la producción de biobutanol está teniendo un mayor auge por ser un biocombustible muy importante debido a sus características (Cuadro 1.1), como alta densidad energética (32 MJ/I), bajo punto de congelación, baja corrosividad (puede ser transportado por tuberías), alta hidrofobicidad y bajo calor de vaporización (0.43 MJ/Kg) cercano al de la gasolina [3, 14].

Sin embargo la principal característica del biobutanol y por el cual se considera de mayor importancia que los combustibles alcohólicos como lo son el metanol y etanol, es que esta puede agregarse a la gasolina sin un tratamiento previo, o incluso puede llegar a remplazarla, ya que es más fácil de producir que los combustibles fósiles, como lo son el petróleo y el diésel [2].

Parameter	Petrol	Diesel	Methanol	Ethanol	n-Butanol
Energy density [MJL ⁻¹]	32	39-46	16	19.6	27-29.2
Vapour pressure at 20°C [kPa]	0.7-207	<0.07	12.8	7.58	0.53
Motor octane number	81-89	-	97-104	102	78
Boiling point [°C]	27-225	180-343	64.5-65	78-78.4	117-118
Freezing point [°C]	<-60	-40 to -9.9	-97 to -97.6	-114 to -114.5	-89.3 to -89.5
Air-fuel ratio	14.6	-	6.5	9.0	11.2
Density at 20 °C [g mL ⁻¹]	0.74-0.80	0.829	0.787	0.785	0.810

Cuadro 1.1: Características de diferentes biocombustibles.

Otra característica específica del biobutanol es la capacidad que tiene de reducir las emisiones de óxidos nitrosos (uno de los gases del efecto invernadero) [20].

Los mayores productores de butanol en el mundo son Estados Unidos y Brasil, aportando del 20 al 30 % de la producción de este biocombustible [14].

En el caso del butanol, uno de los métodos más investigados, estudiados y viables para su producción a nivel industrial es el proceso de fermentación ABE (Acetona-Butanol-Etanol) en la cual además de que se utiliza biomasa renovable como los residuos agrícolas, papeleros o de maderas, presenta una alta eficiencia logrando reducir los costos de producción del biocombustible [14].

La fermentación ABE es un proceso anaeróbico en el que las cepas productoras de disolventes, producen acetona, butanol y etanol a partir de sustratos (como glucosa y almidón), además de ácidos orgánicos (ácido acético, butírico y láctico) y gases (CO₂ y H₂) [6, 36]. Los microorganismos más utilizados en la fermentación ABE son de la especie Clostridia, como *Clostridium acetobutylicum*, *Clostridium saccharobutylicum*,

Clostridium saccharoperbutylacetonicum y *Clostridium beijerinckii* [20]. Este último es capaz de producir químicos debido a su capacidad para utilizar azúcares como pentosa y hexosa, además de que muestra un mayor potencial para la producción del biobutanol [15, 38].

Sin embargo este proceso está limitado por el alto costo, el bajo rendimiento y la baja concentración de butanol debido a la toxicidad que este presenta con el microorganismo [18, 33, 47]. Es por eso que normalmente las concentraciones del biocombustible no superan los 15 g/L por lo que una serie de investigaciones se enfocan en tratamientos que reduzcan este problema, como el uso de biomasa lignocelulósica hidrolizada [2, 20].

Normalmente los procesos biológicos son arcaicos o muy rutinarios, es decir que su operación se basa principalmente en la experiencia acumulada por los operadores de esta clase de procesos. El diseño de la operación del proceso puede mejorarse a través de estudios sistemáticos de optimización y control. Los estudios de optimización permiten determinar el mejor punto de operación para procesos continuos y la mejor trayectoria de operación para procesos lote. Una vez que se ha elegido el punto o trayectoria de operación deseada, se requiere garantizar la operación del proceso a pesar de cambios en variables de entrada, principalmente fluctuaciones de la carga orgánica en bioprocesos. Para tal fin, es necesario el diseño de controladores.

Para lo cual se deben considerar tres aspectos fundamentales al diseñar controladores en los procesos biológicos: (i) Robustez de los controladores, que se refiere a la tolerancia de los controladores que se diseñan a incertidumbres del modelo con el cual se basa el diseño de control. (ii) Información limitada de las variables del proceso, es decir, la medición de la mayoría de las variables no están disponible en línea o forma instantánea. (iii) Modelos matemáticos simples, es decir representaciones del proceso de manera simplificada.

Para los controladores es fundamental conocer el comportamiento del proceso a controlar y por lo tanto es deseable contar con un modelo matemático dinámico que describa el proceso. En este sentido, se conoce que para fines de optimización y control de procesos, los modelos deben ser simples y deben reproducir las tendencias principales del proceso. Por otro lado, antes de diseñar cualquier controlador, es necesario evaluar la propiedad de controlabilidad del proceso a controlar. La controlabilidad se refiere a la capacidad que tiene la entrada de control para influir en la

evolución de las variables o estados del sistema a controlar [31].

El uso del control en la producción y/o generación de biocombustibles se encuentra reportado en la literatura por diversas fuentes, las cuales estudian también la dinámica del proceso [5]; en el caso del proceso de fermentación ABE, de acuerdo a la revisión de literatura, solo existe una propuesta de diseño de control [22]. Por otro lado, existen algunos trabajos que reportan modelos matemáticos dinámicos de la operación lote o continúa [30, 37, 42, 49].

Debido a la relevancia de la fermentación ABE, en este trabajo se realizará el diseño de esquemas de control robustos para el control de la producción de ABE.

1.2. Justificación

La fermentación ABE ha sido estudiada desde inicios del siglo XX, en donde la acetona era el producto con más valor debido a que era utilizado para los explosivos usados en la Primera Guerra Mundial. Fue hasta los 30's que esta fermentación alcanzo el segundo lugar en las fermentaciones a nivel industrial, sin embargo a inicios de los 60's este proceso fue descontinuado por la competencia tan fuerte que había con la industria petroquímica, no obstante en la década de los 70's, el interés por la fermentación ABE resurgió provocando que para las décadas posteriores los avances sobre este proceso usando *Clostridia* mostraran un impactante progreso [9].

El poder obtener un proceso de fermentación continua y controlada, mejoraría la productividad del biobutanol y además disminuiría los costos de operación; pero para esto es necesario contar con un estudio completo sobre el proceso, el cual se obtiene mediante un modelado matemático [22]. Así, con la finalidad de mejorar la operación de procesos continuos de producción de biobutanol a través de la fermentación ABE y hacer más atractivo el proceso, es deseable contar con esquemas de control que garanticen la operación del proceso en un punto de operación dado.

Previo al diseño de control es necesario conocer las características del proceso y evaluar si el proceso es controlable con la finalidad de realizar un diseño de los controladores que tengan buenas propiedades de desempeño [28]. En efecto, en el diseño de control es de suma importancia conocer la dinámica del proceso, es decir cómo se comportan con el tiempo las variables importantes del proceso para que así se

puedan aplicar ciertas acciones para mantener en ciertos valores o rangos la variable que se desee según se requiera para cumplir con ciertos estándares o requerimientos [39].

Además poder contar con un estudio de la controlabilidad del sistema es muy importante debido a que este nos dirá si el proceso puede o no ser controlado, ya que aunque la mayoría de los sistemas físicos lo son, algunos modelos matemáticos pueden no poseer las características de controlabilidad, es decir que es necesario conocer hasta qué punto un sistema puede controlarse [31].

1.3. Control de bioprocesos

Los procesos industriales se forman por un conjunto de operaciones unitarias como lo son destiladores, absorbedores, evaporadores, reactores, etc., los cuales se enlazan por medio de bombas, válvulas, tuberías, etc. La configuración de tales procesos y la operación en determinadas condiciones tienen la finalidad de convertir una materia prima en un producto de interés y garantizar cierta calidad, en cierto tiempo y sin problemas de producción. Sin embargo, esto puede llegar a complicarse debido a las fallas de equipo o instrumento, a cambios imprevistos de materia prima, y en general a la presencia de perturbaciones externas o internas. Con la finalidad de garantizar la operación del proceso en un valor deseado, a pesar de tales escenarios, es necesario el diseño e implementación de sistemas de control de procesos. El control de procesos proporciona además seguridad, mejora la calidad del producto, reduce producto fuera de especificación, y minimiza el efecto de perturbaciones.

El control de procesos ha sido muy utilizado en la industria en diferentes procesos industriales, tales como procesos mecánicos, eléctricos, electroquímicos, farmacéuticos, biológicos, biomédicos, petroleros, automovilísticos, etc. Cada una de estas áreas de aplicación tienen características particulares. En el caso de procesos biológicos, tales como el interés de este trabajo, el diseño de control debe de considerar lo siguiente: (i) Modelos matemáticos con una elevada incertidumbre, (ii) Cambios de comportamiento del proceso en diferentes regiones de operación (concentraciones de sustratos altas o bajas, flujos altos o bajos, etc.), (iii) Mediciones limitadas.

El uso de control en los procesos químicos ha sido muy abordado en la literatura, sin embargo, el control de bioprocesos ha sido menos abordado. Algunos trabajos

relacionados al control en la producción de bioprocesos continuos para producción de biocombustibles son los siguientes:

- Rani y colaboradores (1999), presentan una revisión del estado del arte del control de fermentadores en bioprocesos[35].
- Mjalli y colaboradores (2009) diseñaron un esquema de control adaptable para el control de biodiesel en un CSTR con base a un modelo no-lineal [26].
- Mjalli y Hussain (2009) comparan un control de modo predictivo con el control adaptable para la producción de Biodiesel en un CSTR [25].
- Ochoa y colaboradores (2010) proponen un esquema de control de planta completa para la producción continua de bioetanol [27].
- Bildea y colaboradores (2011) estudiaron el problema de control y las propiedades de controlabilidad de la producción de biodiesel por absorción reactiva usando Aspen Plus [4].
- Ignat y Kiss (2013) proponen el diseño óptimo y el control clásico para la producción de Biodiesel a través de la destilación reactiva con base a simulaciones rigurosas en Aspen Plus [16].
- Brasio et al (2013) Introducen un control de modo predictivo con base al modelo no-lineal de la producción de Biodiesel en un CSTR [5].
- López-Pérez et al (2015) proponen un controlador con estructura no-lineal para incrementar la producción de biohidrogeno en un reactor biológico continuo tipo tanque agitado.
- Velázquez-Sánchez et. al. (2016) proponen un controlador no-lineal para incrementar la producción de biohidrógeno en un reactor continuo usando una bacteria sulfato-reductora [44].

En el caso del biobutanol, los trabajos reportados en la literatura son principalmente de aspectos fundamentales y de las ventajas de su uso como combustible alternativo. Por ejemplo:

- Ezeji y colaboradores (2007) revisan el estado del arte de la producción de biobutanol desde aspectos genéticos hasta diferentes configuraciones de reactores [10].
- Kumar y Gayen (2011) discuten los desarrollos actuales en el campo de ingeniería metabólica y genética para la producción de biobutanol [21].
- García y colaboradores (2011) identifican los problemas operacionales para incrementar la producción de biobutanol [13].

Los aspectos del modelado y el control de la producción de biobutanol a través de la fermentación ABE son también escasos. De la revisión de literatura, solo se reportan los siguientes trabajos:

- Mariano y colaboradores (2010) reportan el diseño de un control multivariable basado en una matriz dinámica y comparan su desempeño con el control clásico PI. La concentración de sustrato se controla manipulando el flujo de entrada al fermentador y la concentración de butanol manipulando el flujo de entrada al fermentador o el flujo de entrada al tanque flash y la concentración de biomasa se controla manipulando el flujo de purga [22].
- Mayank y colaboradores (2013) presentan una revisión del estado del arte de modelos para la fermentación ABE [23].
- Eom y colaboradores (2015) proponen un modelo para la producción continua de biobutanol en un fermentador continuo y un tanque de adsorción [8].
- Millat y Winzer (2017) presenta un modelo para la producción de butanol por medio de la fermentación ABE y *Clostridium acetobutylicum* [24].
- Velázquez-Sánchez y colaboradores (2017) introducen un control basado en modelo no-lineal para el control del biobutanol en un CSTR [43].

En la literatura se han propuesto dos controladores que presentan buenas propiedades para el control robusto de procesos químicos y biológicos: (i) el control robusto basado en estimación y compensación de incertidumbres, y (ii) el control robusto basado en modo deslizante. Las ventajas de los controladores anteriores incluyen: (i) Diseño simple. (ii) Buenas propiedades de robustez. (iii) Buen desempeño [1, 31].

1.4. Hipótesis

- Es posible mejorar la operación de reactores continuos para la fermentación ABE a través de controladores robustos.
- El control por técnicas de compensación de error de modelado proporciona buenas propiedades de robustez para el control de la producción ABE.

1.5. Objetivos

1.5.1. Objetivo General

Evaluar la controlabilidad y diseñar esquemas de control robusto en un reactor continuo de producción de biobutanol a través de la fermentación ABE.

1.5.2. Objetivos Específicos

- Estudiar la producción de Biobutanol a través de la fermentación ABE.
- Estudiar la ruta metabólica de la fermentación ABE.
- Diseñar un esquema de control robusto para la producción de Biobutanol a través de la fermentación ABE en un CSTR.
- Evaluar el algoritmo del controlador en la producción de Biobutanol

1.6. Estructura de la tesis

Este trabajo está organizado de la siguiente manera:

- En el capítulo 2 se proporciona el marco teórico , incluyendo una descripción más detallada de la producción de biobutanol a través de la fermentación ABE, así como definiciones y terminología de los conceptos a utilizar en el desarrollo de los esquemas de control robusto. Se presentan también aspectos generales del modelamiento matemático y su análisis.

- En el capítulo 3 se presenta el modelo matemático del caso de estudio y sus propiedades, así como las simulaciones bajo diferentes escenarios.
- En el capítulo 4 se presenta el diseño de control y se implementa a través de simulaciones numéricas. Además se presenta un estudio numérico para evaluar la controlabilidad del proceso en diferentes regiones de operación.
- Finalmente en el capítulo 5 se discuten las conclusiones del trabajo.

Capítulo 2

Marco Teórico

Este capítulo presenta conceptos fundamentales de tres aspectos para entender y desarrollar el esquema de control robusto en la producción de biobutanol en reactores continuos. Primero se describen algunas generalidades del biobutanol. Posteriormente se presentan conceptos de modelado matemático y su análisis. Finalmente se introducen conceptos de control de procesos.

2.1. Butanol

El butanol o ácido butírico, es un alcohol primario con una fórmula química C_4H_9OH . El butanol es un producto líquido incoloro que al evaporarse puede provocar irritaciones al ser humano en ojos, nariz y garganta [12]. En condiciones normales de uso, el butanol es un producto estable, sin embargo puede ser peligroso si no se trata con cuidado, por eso es necesario tener en cuenta que es un producto altamente flamable y al estar en contacto con otros compuestos orgánicos en la atmosfera, provoca smog [12].

El butanol puede usarse como un intermediario en procesos químicos, o como un disolvente en la industria. entre los procesos que se utiliza, se encuentra la industria cosmetiquera, la farmacéutica y en la elaboración de detergentes. Sin embargo, el butanol es considerado el alcohol de mayor importancia para los biocombustibles de segunda generación, superando al etanol, debido a que gracias a sus características físicas, el butanol puede ser un excelente reemplazo de la gasolina [12, 33, 41].

Además otra de las razones por las cuales la producción de butanol es más atractiva que la del etanol, es debido a que el proceso para producirlo también genera un porcentaje de etanol entre los productos de valor, sin embargo el proceso para producir el etanol, solo se obtiene este como producto final [29].

Aunque la producción industrial de butanol y la investigación sobre este biocombustible ha mostrado un importante crecimiento, en los últimos años [29], el proceso es muy limitado debido a la producción de lodos, altos costos de la materia prima y bajos rendimientos por la inhibición de los microorganismos utilizados en la misma, trayendo consigo la baja concentración de butanol [33].

A pesar de que básicamente solo se conoce la fermentación ABE para la producción de butanol, las investigaciones se enfocan en encontrar una manera de bajar los costos del sustrato usando diferentes tipos de materia prima, como los residuos de madera o agrícolas y el bagazo [32]. Esto es gracias a que se demostró que la especie *Clostridia* tiene la capacidad para producir este alcohol a partir de azúcares simples y complejos, como la pentosa y hexosa, así como el CO_2 , H_2 y CO [17].

La producción de butanol es muy importante ya que impacta benéficamente a los problemas globales como lo es el calentamiento global, el cambio climático, la escasez y uso restringido de los recursos no renovables como el petróleo y gas natural.

2.2. Producción de butanol

Los procesos para la producción de butanol son escasos y muestran algunas desventajas como lo son, los costos de materia prima y producción, los rendimientos en la obtención del butanol y los tiempos de operación. Para producir el butanol básicamente se conocen dos procesos: i) Hidroformilación (Proceso químico) y ii) Fermentación (Proceso bioquímico).

2.2.1. Hidroformilación

Uno de los procesos para la producción del butanol es mediante síntesis química, usando la ruta de hidroformilación o proceso oxo, llamado así por su descubridor Otto Roelen en 1938.

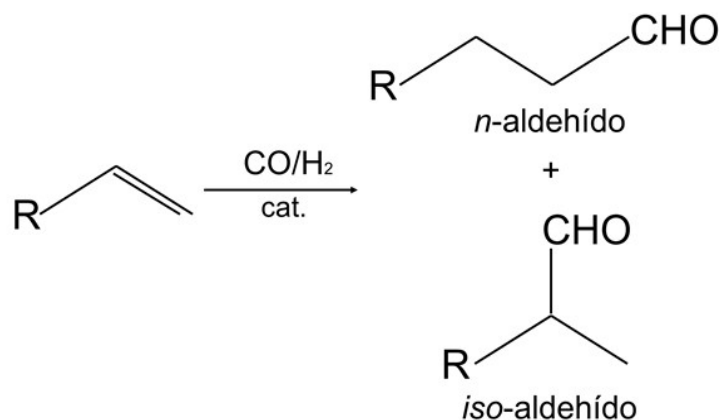
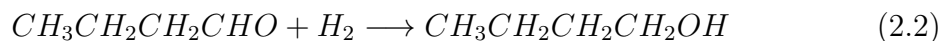
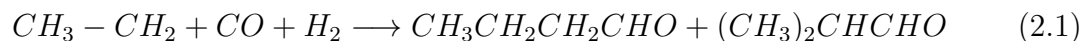


Figura 2.1: Principio de la hidroformilación

La hidroformilación (Ver Figura 2.1) conocida así por el hidrógeno (hidro) y el grupo formil (H-C=O), es la reacción entre el síntesis de gas (mezcla de monóxido de carbono e hidrógeno) y las olefinas (principalmente el propileno), con la presencia de un catalizador que propicie la formación de los aldehídos [11], para después pasar por un proceso de hidrogenación y una destilación para separar los compuestos y obtener finalmente al butanol [12].

Las principales reacciones de la hidroformilación del propileno (reacción 2.1) para formar el butanol hidrogenando la reacción (reacción 2.2) se muestran a continuación:



2.2.2. Fermentación ABE

La fermentación ABE para la producción de butanol, ha sido uno de los procesos bioquímicos más importantes, sin embargo aunque a sus inicios tuvo un increíble auge, el proceso fue sustituido por la industria petroquímica, la cual logro sacar del mercado a dicha fermentación; pero debido a la constante preocupación sobre el posible agotamiento del petróleo, la fermentación ABE ha sido retomada enfocando

los estudios en encontrar una mejora en los rendimientos y bajar el costo de la materia prima, utilizando biomasa obtenida de residuos agrícolas o industriales.

La fermentación ABE es un proceso biológico en el cual los microorganismos de la especie *Clostridia*, transforma azúcares, principalmente glucosa, en solventes (acetona, butanol y etanol). La ruta de la fermentación ABE consta de dos etapas, acidogénesis y solventogénesis; mismas que constan de 19 reacciones según lo reportado por [48](Ver figura 2.2).

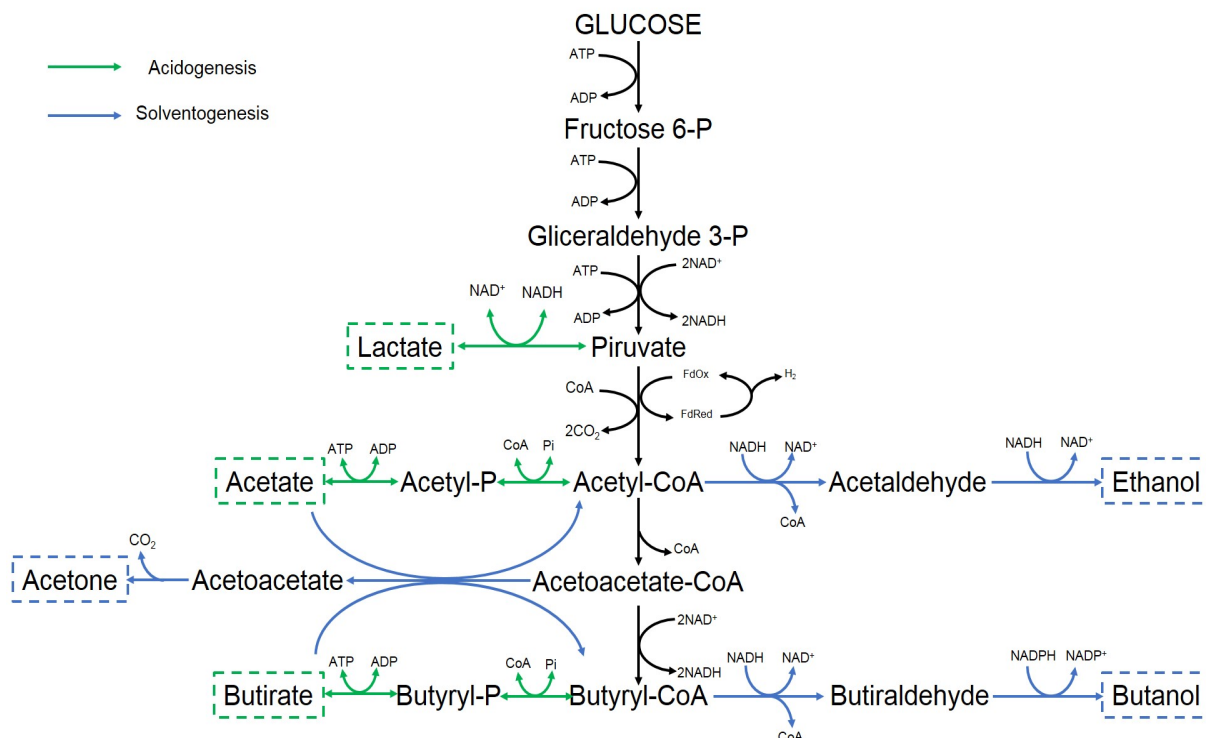


Figura 2.2: Ruta metabólica de la fermentación ABE

En la primera etapa (acidogénesis), que es donde se obtiene la fase inicial de crecimiento bacteriano, se producen principalmente los ácidos acético, láctico y butírico además de hidrógeno y dióxido de carbono. Debido a la producción de los ácidos, el pH muestra una disminución afectando directamente al metabolismo del microorganismo consiguiendo que se inicie la segunda fase [33].

En la segunda etapa (solventogénesis), ya no se presenta un crecimiento bacteriano considerable, es decir, se habla de una fase estacionaria de crecimiento; es en esta fase donde se forman los principales productos que son el etanol, acetona y butanol [42].

La fermentación inicia cuando un microorganismo de la especie *Clostridium* lleva a cabo la glicólisis para formar piruvato, este último forma Acetil-CoA seguido de Acetoacetato-CoA y Butiril-CoA los cuales son los precursores de los solventes.

En la fase acidogénica, el piruvato sintetizado por la glicolisis produce de manera directa ácido láctico o lactato mediante la enzima piruvato deshidrogenasa [40]. Por otra parte, dentro de esta fase se forma acetato derivado de Acetil-P el cual se produce por Acetil-CoA. Este último también conlleva a la formación de Butiril-CoA que produce butirato, el cual es de suma importancia para la formación de acetona y butanol en la segunda fase.

En la fase solventogénica, el etanol se forma por Acetil-CoA de manera irreversible, mientras que la acetona se forma directamente por Acetoacetato-CoA y de manera indirecta por el acetato y butirato formados en la etapa anterior. El producto de mayor interés es el butanol, el cual se forma en la segunda fase por medio del Butiril-CoA de manera irreversible.

2.3. Bioreactores

Las unidades donde se llevan a cabo reacciones que involucran microorganismos y compuestos orgánicos se denominan biorreactores. Existen varios tipos, las características de los principales son las siguientes:

1. Bioreactor lote: Consiste en una unidad de reacción simple que se carga con los microorganismos y la carga orgánica a consumir en un tiempo inicial. Posteriormente se lleva a cabo la reacción durante un determinado tiempo de operación. Finalmente se descargan los productos. Esta unidad tiene la ventaja de su simplicidad y flexibilidad. Las desventajas principales son los costos de operación y que no es sencillo garantizar uniformidad de las condiciones de productos.

2. Bioreactor semi-lote: Es muy similar al caso lote con la adición continua o discontinua de algún componente, lo cual mejora la uniformidad de productos.

3. Biorreactor continuo de tanque agitado: Consiste en una unidad de reacción con corrientes que entran y salen en forma continua, la cual se encuentra perfectamente mezclada para homogenizar las condiciones de operación. Este tipo de reactor tiene la ventaja de mejorar la uniformidad de productos al facilitar el control de la misma.

Comparada con los reactores lote y semi-lote es más costoso su equipamiento y menos costosa su operación. La conversión es menor a la que se obtiene en reactores lote y tubulares.

4. Biorreactor continuo tubular: Consiste en una unidad de reacción, comúnmente en forma tubular, con corrientes que entran y salen en forma continua, en la cual la mezcla reactante que entra se desplaza a lo largo del reactor con o sin mezclado de la misma. Conduce a una mejor conversión de productos por unidad de volumen, sin embargo por sus variaciones en posición es más difícil su operación y control que otros reactores continuos.

En el caso de los reactores lote y semi-lote, una conversión final de productos determinada se obtiene por medio de un perfil o trayectoria de las variables del reactor durante el tiempo de operación. Los procesos continuos por otra parte se deben de operar para mantener las concentraciones de producto a la salida del reactor en forma constante.

2.4. Modelado fenomenológico de procesos

Para mejorar el entendimiento de un proceso, es deseable formular un modelo matemático que retenga los fenómenos de reacción y transporte más relevantes.

El modelado de procesos principalmente se usa para entender el objeto de estudio de una manera matemática, mediante una serie de ecuaciones diferenciales. Uno de los procesos que pueden llegar a ser más complejos debido a sus cinéticas, es el caso de los sistemas biológicos. Es por eso que el poder abstraer información de estos procesos, mediante modelos que representen los datos experimentales, llega a ser muy valioso para el análisis de procesos, ya que contando con un conjunto de ecuaciones, se puede realizar la simulación, la optimización y el control [46].

Para la formulación de un modelo matemático, es necesario tomar en cuenta los principios de conservación tanto de masa, como de energía y movimiento. Mientras más se acerque a las leyes físicas, el modelo representará de mejor manera al sistema. Con esto la formulación nos dará como resultado una serie de ecuaciones diferenciales demostrados en los balances de materia y energía, representados como:

$$\text{Acumulación} = \text{Entradas} - \text{Salidas} + \text{Producción} - \text{Consumo}$$

2.5. Modelado por identificación empírica

Los modelos matemáticos suelen ser muy útiles en los procesos, ya que gracias a estos se pueden obtener las tendencias principales de este mediante ecuaciones matemáticas, sin embargo para el uso de estos en control u optimización es necesario contar con un modelo simple para facilitar su aplicación y análisis. En control de procesos existe un método que relaciona la dinámica con las variables de entrada y salida, el cual es llamado identificación empírica.

La identificación empírica es un tipo de modelado en el que según la respuesta del proceso, se obtienen los valores de ciertos parámetros. Para esto es necesario realizar cambios en variables, como el uso de una perturbación, y ver cómo se comporta nuestro sistema antes y después del cambio. La principal desventaja de este procedimiento es que solo es válido en ciertas regiones.

El proceso de identificación empírica por el método de curva de reacción consiste en 5 pasos:

1. Permitir que el proceso logre un estado estacionario.
2. Introducir un cambio escalón en la entrada de control.
3. Obtener los datos de la respuesta de salida hasta que el proceso logre un nuevo estado estacionario.
4. Seleccionar un modelo de bajo orden (primer orden, segundo orden, o primer orden con tiempo muerto).

Un modelo de primer orden en el dominio del tiempo y de Laplace se puede escribir como:

$$\tau_p \frac{dy}{dt} + y = k_p u \quad \frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{k_p}{\tau_p s + 1}$$

Un modelo de segundo orden en el dominio del tiempo y de Laplace se tiene:

$$\tau_p^2 \frac{d^2 y}{dt^2} + 2\xi\tau_p \frac{dy}{dt} + y = k_p u \quad \frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{k_p}{\tau_p^2 s^2 + 2\xi\tau_p s + 1}$$

Un modelo de primer orden más tiempo muerto está dado por:

$$\frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{k_p}{\tau_p s + 1} \exp(-\tau_d s)$$

5. Realizar los cálculos de los parámetros del modelo de bajo orden.

2.6. Incertidumbres de modelos matemáticos

Las incertidumbres se refieren al desconocimiento que se tiene sobre respuestas futuras, sin embargo el no tomarlas en cuenta significa ausencia de información. En la industria, las incertidumbres pueden derivarse de la medición de las variables, del proceso mismo, del modelo utilizado o de la implementación. Las incertidumbres en la medición pueden obtenerse por la sensibilidad de los sensores utilizados, o la mala colocación de estos, las incertidumbres en el proceso pueden obtenerse por las fallas de algún equipo, la calidad de la materia prima o por los cambios de temperatura que existen en el lugar; las incertidumbres del modelo se refieren a los datos que no se toman en cuenta al hacer las consideraciones de este, como los valores de los parámetros o la validez del modelo en ciertas regiones y por último las incertidumbres de implementación pueden ser debidos a la falla en el escalamiento de planta piloto a planta industrial.

2.7. Análisis matemático y numérico

Un modelo matemático de un proceso se puede analizar en forma matemática y numérica para extraer información relacionada al comportamiento del proceso que se modela. Dos conceptos importantes en control son los puntos de equilibrio y la estabilidad de los mismos.

2.7.1. Puntos de equilibrio

El o los puntos de equilibrio de un modelo matemático con un vector de estados $x(t)$, son los valores del vector de estados del sistema una vez que $x(t)$ es igual a x^* y no cambian respecto al tiempo. Para un modelo dinámico no-lineal de un proceso,

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t)$$

la definición anterior implica que las derivadas respecto al tiempo son cero, y en forma general conduce a un sistema de ecuaciones algebraicas no-lineales de la forma,

$$f(x^*) = 0$$

Los puntos de equilibrio de un modelo de un proceso representan posibles puntos de operación en un valor constante, que pueden corresponder a una condición de diseño del proceso que se modela, o bien otros puntos de operación posibles.

2.7.2. Estabilidad en un punto de equilibrio

La convergencia o no de las soluciones de un modelo dinámico a un punto de equilibrio depende de la propiedad de estabilidad. Un punto de equilibrio es estable si a partir de una condición inicial dada cerca del punto de equilibrio, la trayectoria de los estados converge o se mantiene alrededor del punto de equilibrio en todo instante. De otra forma es inestable.

Para determinar la estabilidad de un punto de equilibrio se puede usar la teoría de Lyapunov. El trabajo de Liapunov incluye dos métodos para el análisis de estabilidad: (i) El método directo determina las propiedades de estabilidad de un sistema no lineal construyendo funciones escalares "tipo-energéticas" para el sistema y examinando la variación del tiempo de la función. Sin embargo, no existe un método para construir las funciones escalares y además implican matemáticas avanzadas. (ii) El método indirecto o por medio de linealización conduce a conclusiones acerca de las propiedades de estabilidad local, de la aproximación lineal de un sistema no lineal,

alrededor de un punto de equilibrio.

Para sistemas linealizados en un punto de equilibrio de la forma,

$$\frac{dx}{dt} = Ax$$

o

$$\frac{dx}{dt} = Ax + Bu$$

el punto de equilibrio se dice que es estable si todos los eigenvalores de A están en el semiplano izquierdo complejo abierto; esto es, la parte real es negativa.

2.7.3. Linealización de un modelo no-lineal

El proceso de linealizar sistemas no lineales es importante, debido a que esto permite aplicar numerosos métodos de análisis lineal que proporcionan información acerca del comportamiento de sistemas no lineales.

Las bases de la linealización es la expansión en series de Taylor de las funciones no-lineales y eliminar los términos no-lineales (potencias ≥ 2). Este procedimiento conduce a la definición del Jacobiano,

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_m}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

la cual se evalúa en un punto de equilibrio.

2.7.4. Función de transferencia

Un modelo lineal para fines de control se puede escribir en el tiempo en forma matricial como,

$$\frac{dx(t)}{dt} = Ax(t) + Bu(t)$$

el cual se puede obtener al linealizar un modelo matemático no-lineal de un proceso en un punto de equilibrio. Para un problema de control, se tiene además la ecuación de mediciones,

$$y(t) = Cx(t) + Du(t)$$

donde C y D son matrices de dimensión apropiada que conducen al resultado de la medición que se tiene.

Debido a la estructura lineal de las dos ecuaciones anteriores, se puede tomar la transformada de Laplace, re-ordenar y obtener lo que se conoce como función de transferencia del proceso,

$$G(s) = \frac{Y(s)}{U(s)} = C(sI - A)^{-1}B + D$$

La cual se puede poner como una relación de dos polinomios de la variable de Laplace,

$$G(s) = \frac{(a_ms^m + a_{m-1}s^{m-1} + a_{m-2}s^{m-2} + \dots + a_0)}{(b_ns^n + b_{n-1}s^{n-1} + b_{n-2}s^{n-2} + \dots + b_0)}$$

La función de transferencia es un modelo del proceso en el dominio de la frecuencia. El orden relativo del sistema es la diferencia entre el orden del denominador y el orden del numerador. Los ceros son las raíces del polinomio del numerador de la función de transferencia. Los polos del sistema lineal son las raíces del polinomio del denominador de la función de transferencia. Los polos permiten determinar la estabilidad del sistema. Si los polos del sistema permanecen en el semiplano izquierdo complejo el sistema es estable.

2.7.5. Simulaciones numéricas

La simulación de procesos es la representación visual de la resolución numérica de un modelo matemático. Gracias a la simulación de procesos, se pueden mejorar las eficiencias en la producción, ya que con los resultados obtenidos de estas, pueden analizarse posibles problemas que puede llegar a tener el proceso, ya que es posible ver los efectos de ciertos parámetros en el resultado final.

Puebla reporta que la simulación de procesos se puede formular en cinco pasos: la identificación del problema, la localización de los datos necesarios, la selección de la plataforma de simulación, la utilización de los recursos de cómputo adecuado y el análisis de los resultados obtenidos [31] .

Algunos de los simuladores de procesos más utilizados a nivel industrial y de investigación son Aspen Plus, ChemCad, Polymath, Matlab-Simulink, Mathematica, entre otros.

Para la simulación numérica de modelos no-lineales se puede usar además lenguajes de programación como Fortran y Matlab para programar los métodos numéricos que se requieran.

En el caso de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, el método más usado es el Runge-Kutta. El método consiste en obtener soluciones aproximadas para un problema de valor inicial. Existen métodos de RK de varios, órdenes, pero el más conocido es el de cuarto orden. A diferencia de los demás métodos, este realiza un promedio ponderado de las pendientes en el intervalo $x_n \leq x \leq x_{n+1}$.

$$y_{n+1} = y_n + h(w_1k_1 + w_2k_2 + \cdots + w_mk_m)$$

Para el caso de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales, la solución consiste en aplicar algún método de discretización en posición que resulta en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que se pueden resolver con los métodos disponibles para este tipo de ecuaciones.

2.8. Control de procesos

En esta sección se presentan algunos conceptos y términos útiles del control de procesos. Primero se establecen definiciones generales.

2.8.1. Definiciones

Control de procesos. Consiste en influir en la evolución de los estados del sistema, por medio de la manipulación de una variable del sistema para obtener una meta deseada.

Elementos básicos de un sistema de control: Los elementos básicos de un sistema de control son:

- Proceso o unidad a ser controlada: En el caso de esta tesis, el CSTR donde se lleva a cabo la producción de Butanol.
- Sensor: Dispositivo para monitorear la variable a controlar.
- Actuador: Dispositivo para implementar la entrada de control.
- Perturbaciones: Variables que afectan la operación del proceso las cuales no se pueden manipular en forma arbitraria.
- Punto de referencia: Es el valor deseado de la variable a controlar.
- Controlador: Algoritmo o ley de control que usa la medición de la variable a controlar y el valor deseado para calcular la entrada de control.

Configuración retroalimentada. Consiste en la ubicación de los diferentes elementos de un sistema de control de acuerdo a lo que se muestra a continuación (Ver figura 2.3).

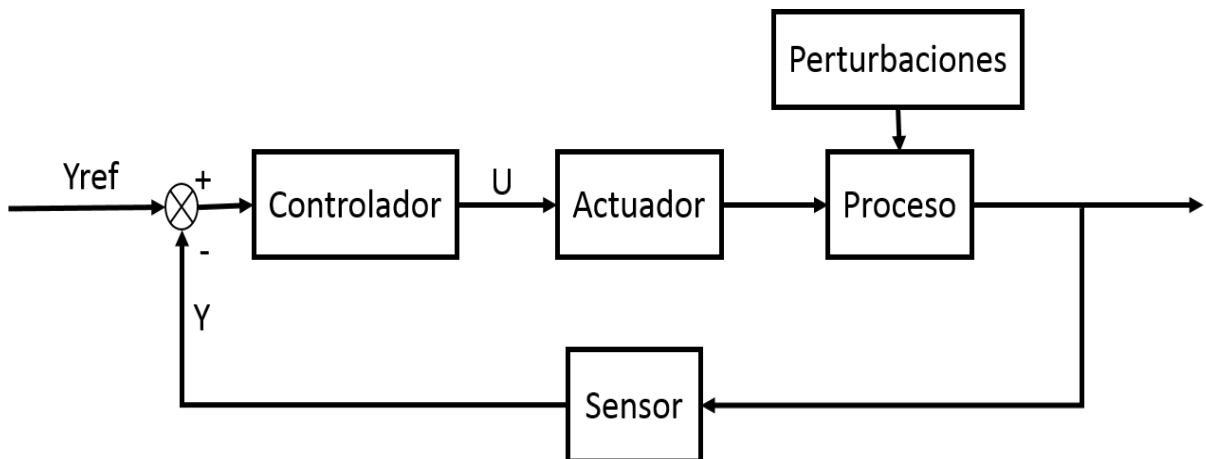


Figura 2.3: Esquema de control con retroalimentación y perturbaciones

En esta configuración, un proceso esta sujeto a la presencia de perturbaciones que pueden ocasionar que el proceso a controlar se desvíe del valor de operación deseado. La variable a controlar se mide por un sensor y se compara con el valor deseado. Si existe una desviación o diferencia se calcula una acción correctiva por medio del controlador.

Robustez de un controlador. El diseño de un controlador se basa en información que se obtiene de un modelo matemático que representa al proceso. La robustez de un controlador se refiere a la capacidad del mismo para tolerar las incertidumbres del modelo sobre las propiedades de un sistema con control, tales como su estabilidad y desempeño.

2.8.2. Pasos para el diseño de sistemas de control

Los pasos generales para diseñar un sistema de control son:

1. Identificar el problema de control: Consiste en establecer la variable a controlar o salida del proceso, la variable a manipular o entrada del proceso, y el tipo de objetivo de control (regulación, seguimiento o posicionamiento).
2. Selección de sensores y actuadores: Consiste en proponer las características de los dispositivos que se requieren para medir la variable a controlar (sensor) y para aplicar la acción de control (actuador).
3. Modelado y simulación del proceso: Tiene la finalidad de mejorar el entendimiento del proceso e identificar el comportamiento del mismo bajo diferentes condiciones de operación.
4. Diseño del controlador: Consiste en diseñar el controlador para el proceso y seleccionar los parámetros del controlador.
5. Implementación numérica y automatización: Consiste en implementar por simulaciones numéricas el controlador y llevar a cabo la implementación real del mismo usando microprocesadores y tarjetas de adquisición y salida de señales.

2.8.3. Control clásico PID

Una de las técnicas de control de procesos más utilizada es el control proporcional-integral-derivativo o PID. La estructura es la siguiente:

$$u(t) = K_c e(t) + \frac{K_c}{\tau_I} \int_0^t e(t) dt + K_c \tau_D \frac{de(t)}{dt}$$

Las variables del controlador son:

- $u(t)$ es la entrada de control.
- $y_{ref}(t)$ es el valor deseado de la variable a controlar.
- $y(t)$ es la medición de la variable a controlar.
- $e(t) = y_{ref}(t) - y(t)$, es el error de regulación (si la referencia es constante) o seguimiento (si la referencia es una trayectoria).
- K_c, τ_I, τ_D , son la ganancia integral, la constante de tiempo integral, la constante de tiempo derivativa; son los parámetros del controlador.

La parte proporcional se utiliza para llevar a cabo una acción correctiva rápida pero no garantiza llevar la referencia al valor deseado. La parte integral es más lenta en respuesta, pero garantiza llegar al valor deseado. La parte derivativa acelera la respuesta de las otras acciones, pero es difícil de implementar en la práctica.

El diseño del controlador PID consiste en la selección de las acciones que se requieren para una aplicación y la asignación de los parámetros del controlador.

2.8.4. Controlabilidad y observabilidad.

Dos conceptos importantes para el diseño de controladores avanzados son la controlabilidad y observabilidad.

Controlabilidad: Es una propiedad del sistema a controlar que indica si es posible influir en los estados del sistema a partir de la manipulación de la entrada de control disponible.

Observabilidad: Es una propiedad del sistema a controlar que indica si es posible reconstruir o estimar los estados no medibles a partir de la medición disponible y un modelo del proceso.

Para evaluar las propiedades anteriores se calculan las matrices de controlabilidad (Matriz 2.3) y observabilidad (Matriz 2.4) y se determina si son linealmente independientes.

$$Co = \begin{bmatrix} B & AB & \cdots & A^{n-1}B \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

$$Ob = \begin{bmatrix} C \\ CA \\ \vdots \\ CA^{n-1} \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

2.9. Estimadores de estados

Para fines de diseño de control, es importante disponer de la medición de la variable a controlar, lo cual en algunas aplicaciones no es posible debido a que no existe un sensor adecuado o es muy costoso. Si un sistema tiene la propiedad que es observable es posible inferir estados no medibles a través de un estimador u observador de estados.

Un observador es un sistema dinámico con datos de entrada de la variable medida $y(t)$ y de la entrada de control $u(t)$, que estima el vector de estados del sistema. Para un modelo lineal, un observador de estados esta dado por,

$$\frac{dx_e(t)}{dt} = Ax_e(t) + Bu(t) + L(y(t) - Cx_e(t))$$

donde L es cualquier matriz tal que $A+LC$ sea estable.

Para un sistema de n estados, el observador de orden completo tiene n estados. El observador puede ser menor al observador de orden completo debido a que la salida medida proporciona una relación lineal $y(t)=Cx(t)$ entre las variables de estado. Por lo tanto es suficiente estimar $n-1$ de los estados del sistema.

2.10. Controlabilidad de sistemas no lineales

La controlabilidad de un sistema no-lineal es difícil de evaluar. En muchos casos, al utilizar la definición básica de controlabilidad para sistemas lineales, se concluye que el sistema no es completamente controlable. Sin embargo, es posible que algunos estados o el estado del sistema que se desea controlar si sean controlables. Para los estados que no son controlables lo que se debe de probar es que son estables.

Una forma práctica de evaluar la controlabilidad de un sistema no-lineal fue propuesta por Maya Yescas y Aguilar-Lpez. La idea es analizar la dinámica de las derivadas de los estados no controlados.

Para un sistema de la forma:

$$\dot{x} = f(x) + G(x)u \quad (2.5)$$

es posible establecer las características de estabilidad de los estados no controlados siguiendo las derivadas de los estados no-controlados. Se considera que un conjunto $x_C(t)$ estn controlados y que un conjunto $x_D(t)$ no se controlan, de modo que la dinámica se puede separar como,

$$\dot{x} = f(x) + G(x)u \longrightarrow \begin{aligned} \dot{x}_C &= f_C(x) + G_C(x)u \\ \dot{x}_D &= f_D(x) + G_D(x)u \end{aligned} \quad (2.6)$$

cuando un sistema esta controlado en un valor deseado, la derivada de los estados controlados es 0, ya que no hay cambio, la cual se puede obtener con el control,

$$u = -\frac{1}{G_{C(x)}} * f_{C(x)} \quad (2.7)$$

$$\dot{x}_D = f_D(x) - \frac{G_{D(x)}}{G_{C(x)}} * f_{C(x)} \quad (2.8)$$

y si las derivadas son negativas o son cero, implican que los estados de las mismas decrecen o no cambian, lo cual esta asociado a un comportamiento estable.

Entonces, para evaluar la estabilidad del sistema con control, las derivadas de los estados no controlados deben tener signo negativo o un valor de cero en un punto de operación controlado.

2.11. Control robusto por compensación de error de modelado.

El control robusto basado en la compensación de error de modelado se considera un modelo de la siguiente forma:

$$\frac{dy}{dt} = f(y, x) + g(y, x) * u \quad (2.9)$$

En donde la y es el estado o la variable a controlar y la x son los estados o variables no controladas.

En este control, se considera que la variable a controlar se puede medir de forma instantánea, que las funciones $f(y,x)$ y $g(y,x)$ son inciertas, que el proceso es afectado por perturbaciones y que además se tiene un estimado de las incertidumbres, representado como:

$$g(y, x) = \bar{g}(y, x) \quad (2.10)$$

Para iniciar el algoritmo de este tipo de control, nos basamos en que un control ideal es expresado de la forma:

$$u(t) = \bar{g}(y, x)^{-1}[-f(y, x) - \tau_c^{-1}e + \frac{dy_{ref}}{dt}] \quad (2.11)$$

Sin embargo, la ley de control anterior (Ecuación 2.11) no se puede implementar debido a las consideraciones que se mencionaron al inicio, así que con base al modelo (Ecuación 2.9) y a las consideraciones, además de usar el error de regulación o seguimiento, el modelo con incertidumbres queda de la siguiente manera:

$$\frac{de}{dt} = \eta(t) + \bar{g}(e, x)u \quad (2.12)$$

Donde $\eta(t)$ son todas las incertidumbres que el modelo pueda tener.

Con base al modelo (Ecuación 2.12), el control robusto quedaría de la siguiente manera:

$$u(t) = -\bar{g}(e, x)^{-1}[\eta(t) + \tau_c^{-1}e] \quad (2.13)$$

Sin embargo, la ley de control (Ecuación 2.13) no se puede implementar debido a que no se conoce el valor del parámetro que se refiere a las incertidumbres, osea $\eta(t)$. Debido a esto es necesario usar un estimador de estados para poder conocer el valor de $\eta(t)$, de la siguiente manera:

$$\frac{d\bar{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1}(\eta - \bar{\eta}) \quad (2.14)$$

Donde la nueva τ_e es una constante del tiempo de estimación.

Con lo anterior (Ecuación 2.12), tenemos que:

$$\eta(t) = \frac{de}{dt} - \bar{g}(e, x)u \quad (2.15)$$

Reordenando las ecuaciones (Ecuación 2.14) y (Ecuación 2.15) tenemos que:

$$\frac{d\bar{\eta}}{dt} = \tau_e^{-1} \left(\frac{de}{dt} - \bar{g}(e, x)u - \bar{\eta} \right) \quad (2.16)$$

Acomodando (Ecuación 2.16)

$$\tau_e \frac{d\bar{\eta}}{dt} - \frac{de}{dt} = -\bar{g}(e, x)u - \bar{\eta} \quad (2.17)$$

Y si definimos al observador de estados como:

$$w = \tau_e \bar{\eta} - e \quad (2.18)$$

Juntando (Ecuación 2.17) y (Ecuación 2.18) nuestra ecuación quedaría de la siguiente manera.

$$\frac{dw}{dt} = -\bar{g}(e, x)u - \tau_e^{-1}(w + e) \quad (2.19)$$

Al tener el observador, se puede encontrar w y con esto el control robusto con incertidumbres quedaría de la siguiente manera:

$$u(t) = -\bar{g}(e, x)^{-1}[-\bar{\eta}(t) + \tau_c^{-1}e] \quad (2.20)$$

Capítulo 3

Modelado y Análisis de la Producción de Butanol en un CSTR

En este capítulo se describe el modelo de la producción del butanol en un CSTR. Posteriormente se presenta el análisis matemático. Con base a simulaciones numéricas se evalúan diferentes escenarios del comportamiento del reactor bajo presencia de perturbaciones. Finalmente, para fines de diseño de control se presenta la identificación empírica.

3.1. Modelo matemático de la producción de butanol en un CSTR.

El modelo del proceso de producción de butanol por medio de la fermentación ABE se establece formulando los balances de materia para las principales especies del proceso. Los modelos de bioprocesos tienen diferentes grados de complejidad que depende en gran medida del modelado de la cinética microbiana y de las especies que se pueden monitorear. Por una parte, un modelado cinético se puede definir como la relación entre las velocidades y concentraciones de los sustratos (la carga orgánica que entra al reactor) y productos. Por otro lado, las variables a monitorear en forma práctica en bioprocesos se reducen a la demanda química de oxígeno o DQO, que está asociada a la cantidad de materia orgánica en el proceso, el consorcio microbiano, y el pH, la conductividad y la temperatura.

Los modelos cinéticos se clasifican como:

1. Modelos no estructurados, en donde la carga orgánica y los microorganismos se agrupan en un solo tipo. 2. Modelos metabólicos, que toman en cuenta rutas metabólicas simplificadas. 3. Modelos estructurados, los cuales incluyen o toman en cuenta el metabolismo del microorganismo que está formado por varias especies. 4. Modelos segregados, que determinan a la distribución del microorganismo como una propiedad.

Para fines de control de procesos, es deseable contar con un modelo tan simple como sea posible, para facilitar su análisis, pero que retenga las características dominantes del proceso.

Los procedimientos que deben seguir los balances de materia deben ser los siguientes:

$$\text{Acumulación} = \text{Entradas} - \text{Salidas} + \text{Producción} - \text{Consumo}$$

Tomando en cuenta que a la entrada tenemos una velocidad de flujo volumétrico F_0 y a la salida F , y que existe una concentración del componente 1 a la entrada X_1 y otra concentración de componente 1 a la salida X_2 , entonces tenemos que:

$$\frac{dX}{dt} = F_1 * X_1 - F_2 * X_2 + Rx * V \quad (3.1)$$

Al ser continuo el proceso, la velocidad de flujo volumétrico es la misma, quedando de la siguiente manera:

$$\frac{dX}{dt} = F(X_1 - X_2) + Rx * V \quad (3.2)$$

Si se divide entre el volumen, el cual es constante, la expresión queda de la siguiente manera:

$$\frac{1}{V} * \frac{dX}{dt} = \frac{F}{V} * (X_1 - X_2) + Rx \quad (3.3)$$

Introduciendo la definición de tasa de dilución que es $D=F/V$, tenemos que:

$$\frac{1}{V} * \frac{dX}{dt} = D * (X_1 - X_2) + Rx \quad (3.4)$$

Y como se dijo anteriormente, al ser proceso continuo, no existe acumulación, entonces tenemos que:

$$0 = D(X_1 - X_2) + Rx \quad (3.5)$$

De esta manera se obtiene el balance de masa de X componente en un reactor continuo.

Es importante tomar en cuenta que la reacción va a depender de las cinéticas que se utilizan en el sistema, normalmente para el uso de microorganismos se hablan de cinéticas tipo Michaelis-Menten o Monod, aunque existen muchas más que no son tan utilizadas.

Los modelos cinéticos reportados reproducen el metabolismo bacteriano, sin embargo unos son más complejos que otros, eso hace que su aplicación a veces sea limitada, generando nuevos problemas. Es por eso que para este trabajo el caso de estudio estará basado en un modelo cinético no desarrollado de siete ecuaciones diferenciales, tomando en cuenta una ecuación para la velocidad de consumo del sustrato, una para cada producto (incluyendo el acetato y butirato) y una para el crecimiento de biomasa.

En este modelo se toma en cuenta el término de inhibición por butanol, ya que como reporta [9], a tasas de producción relativamente bajas (14 g/L), este alcohol produce inhibición enzimática, disminuyendo la producción de este solvente.

El modelo cinético se hace a partir de cada componente en el sistema, tomando en cuenta los balances de masa de cada uno, con base en el esquema mostrado en la sección 2.6.1.

Para los balances usados en este modelo, el término de acumulación será igual a cero, ya que al ser un sistema continuo, las variables no cambian en el tiempo, es decir, un estado estacionario.

Es importante mencionar que en el modelo se toma en cuenta tanto una entrada de glucosa como de butirato, ya que según lo reportado por [45], esto incrementa la producción de butanol, el cual es el solvente de mayor interés.

El caso de estudio presenta esencialmente una consideración, la cual es que todos los solventes de la fermentación se obtienen a partir de la glucosa y no de butirato, es decir que la glucosa es la fuente de carbono para este trabajo.

En general, el modelo está considerando que todas las reacciones cinéticas son del tipo Michaelis-Menten, mientras que para el crecimiento bacteriano (biomasa) se toma en cuenta una ecuación tipo Haldane-Luong, que describe la inhibición por producto.

A continuación se presentan los balances resultantes en el modelo.

- ,El balance de masa para la Glucosa (sustrato) es el siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{dSg}{dt} = & D(Sga - Sg) - \left[(\mu_{maxx}X) \left(\frac{Sg}{k_{sg} + Sg} \right) \left(1 - \frac{But}{k_{but}} \right) \left(\frac{1}{Y_{xsg}} \right) \right] \\ & - \left[(\mu_{maxsb}X) \left(\frac{Sg}{k_{sbsg} + Sg} \right) \left(\frac{1}{Y_{sbsg}} \right) \right] - \left[(\mu_{maxact}X) \left(\frac{Sg}{k_{sgact} + Sg} \right) \left(1 - \frac{But}{k_{but}} \right) \left(\frac{1}{Y_{actsg}} \right) \right] \\ & - \left[(\mu_{maxet}X) \left(\frac{Sg}{k_{sget} + Sg} \right) \left(\frac{1}{Y_{etsg}} \right) \right] \end{aligned}$$

El primer término agrupa el flujo de glucosa que se tiene en la entrada (glucosa inicial) menos el flujo de glucosa obtenido en la salida; no existe término de generación ya que en la fermentación ABE no existe producción de glucosa, solo consumo, es por eso que los últimos cuatro términos representan el consumo de la glucosa por la biomasa, el butirato, el acetato y el etanol.

- El balance de masa para la biomasa es el siguiente:

$$\frac{dX}{dt} = D(0 - X) + \left\{ \left[(\mu_{maxx}X) \left(\frac{Sg}{k_{sg} + Sg} \right) \left(1 - \frac{But}{k_{but}} \right) \right] - (kdX) \right\}$$

El primer término agrupa el flujo de entrada menos el de salida de la biomasa tomando en cuenta que en el flujo de entrada no hay biomasa pero si a la salida debido al crecimiento del microorganismo; el segundo término se refiere al crecimiento bacteriano tomando en cuenta la inhibición por el butanol y considerando que este depende de la glucosa suministrada al proceso y finalmente restándole la tasa de decaimiento o de muerte del microorganismo.

- El balance de masa para el Butanol es el siguiente:

$$\frac{dBut}{dt} = D(0 - But) + \left[(\mu_{maxbut}X) \left(\frac{Sg}{k_{sgbut} + Sg} \right) \left(\frac{Sb}{k_{sb} + Sb} \right) \right]$$

El primer término agrupa el flujo de entrada menos el de salida del butanol, dado que al inicio no tenemos este alcohol pero si a la salida; el segundo es la generación de butanol en el proceso fermentativo considerando que esta generación depende de la glucosa y el butirato, el cual es el compuesto precursor del butanol.

- El balance de masa para el Butirato es el siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{dSb}{dt} = D(Sba - Sb) + \left[(\mu_{maxsb}X) \left(\frac{Sg}{k_{sbsg} + Sg} \right) \right] \\ - \left[(\mu_{maxbut}X) \left(\frac{Sg}{k_{sgbut} + Sg} \right) \left(\frac{Sb}{k_{sb} + Sb} \right) \left(\frac{1}{Y_{butsb}} \right) \right] \end{aligned}$$

El primer término se refiere a los flujos de entrada y salida de butirato, el segundo es la producción de butirato por la glucosa suministrada y el tercer término es el consumo de este para la producción de butanol.

- El balance de masa para el Acetato es el siguiente:

$$\frac{dAct}{dt} = D(0 - Act) + \left[(\mu_{maxact}X) \left(\frac{Sg}{k_{sgact} + Sg} \right) \left(1 - \frac{But}{k_{but}} \right) \right]$$

El primer término se refiere a los flujos de la entrada y salida del acetato, el segundo término es la producción de este dado que es un metabolito asociado al crecimiento y depende de la concentración de butirato en el medio.

- El balance de masa para la Acetona es el siguiente:

$$\frac{dAce}{dt} = D(0 - Ace) + \left[(\mu_{maxace}X) \left(\frac{Sg}{k_{sgace} + Sg} \right) \left(\frac{Act}{k_{aa} + Act} \right) \right]$$

El primer término se refiere a la entrada y salida de Acetona, el segundo hace referencia a la generación de este producto por la glucosa agregada al sistema y por acetato. En este balance no existe término de consumo, debido a que la Acetona es uno de los productos de la fermentación ABE.

- El balance de masa para el Etanol es el siguiente:

$$\frac{dEtOH}{dt} = D(0 - EtOH) + \left[(\mu_{maxet}X) \left(\frac{Sg}{k_{sget} + Sg} \right) \right]$$

El primer término se refiere a la entrada y salida de etanol; mientras que el segundo término se refiere a la formación de este solvente mediante la glucosa agregada al sistema. Este producto no es consumido, por eso no aparece en el balance, además de que la reacción de Acetil-CoA a Etanol es una reacción irreversible.

3.2. Análisis matemático

A partir del modelo que se describe en la sección anterior, se van a determinar el o los puntos de equilibrio del modelo y su estabilidad usando el método indirecto de Lyapunov (el modelo linealizado).

En notación vectorial el modelo esta dado por,

$$\begin{aligned}
 \frac{dx_1}{dt} &= D(x_{1,in} - x_1) - \left[(\mu_{maxx}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sg} + x_1} \right) \left(1 - \frac{x_3}{k_{but}} \right) \left(\frac{1}{Y_{xsg}} \right) \right] \\
 &- \left[(\mu_{maxsb}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sbsg} + x_1} \right) \left(\frac{1}{Y_{sbsg}} \right) \right] - \left[(\mu_{maxact}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sgact} + x_1} \right) \left(1 - \frac{x_3}{k_{but}} \right) \left(\frac{1}{Y_{actsg}} \right) \right] \\
 &- \left[(\mu_{maxet}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sget} + x_1} \right) \left(\frac{1}{Y_{etsg}} \right) \right] \\
 \frac{dx_2}{dt} &= D(0 - x_2) + \left\{ \left[(\mu_{maxx}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sg} + x_1} \right) \left(1 - \frac{x_3}{k_{but}} \right) \right] - (kdx_2) \right\} \\
 \frac{dx_3}{dt} &= D(0 - x_3) + \left[(\mu_{maxbut}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sgbut} + x_1} \right) \left(\frac{x_4}{k_{sb} + x_4} \right) \right] \\
 \frac{dx_4}{dt} &= D(x_{4,in} - x_4) + \left[(\mu_{maxsb}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sbsg} + x_1} \right) \right] \\
 &- \left[(\mu_{maxbut}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sgbut} + x_1} \right) \left(\frac{x_4}{k_{sb} + x_4} \right) \left(\frac{1}{Y_{butsb}} \right) \right] \\
 \frac{dx_5}{dt} &= D(0 - x_5) + \left[(\mu_{maxact}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sgact} + x_1} \right) \left(1 - \frac{x_3}{k_{but}} \right) \right] \\
 \frac{dx_6}{dt} &= D(0 - x_6) + \left[(\mu_{maxace}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sgace} + x_1} \right) \left(\frac{x_5}{k_{aa} + x_5} \right) \right] \\
 \frac{dx_7}{dt} &= D(0 - x_7) + \left[(\mu_{maxet}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sget} + x_1} \right) \right]
 \end{aligned}$$

Los parámetros utilizados para el análisis matemático y numérico se presentan en el siguiente cuadro.

Constantes (De afinidad, inhibición y muerte)			
kaa	0.05	ksg	24.9959880853557
kbut	8.54109307269528	ksga	25
kd	0.00521401004091205	ksgact	15
ksb	4.56850454872018	ksgb	24.9916622647924
ksbsg	0.05	ksget	0.0514352978983181
Rendimientos de producción			
Yactsg	0.994498681750569	Ysbsg	0.142771420599483
Ybutsb	1.7994382317384	Yxsg	0.131594518474202
Yetsg	0.148825631698044		
Velocidades específicas de producción			
μ_{maxace}	0.0573762886693948	μ_{maxet}	0.00262719801719996
μ_{maxact}	0.061373363427288	μ_{maxsb}	0.0220516397514258
μ_{maxbut}	0.416871805795521	μ_{maxx}	0.0756776102653254

Cuadro 3.1: Parámetros utilizados en la simulación del caso de estudio. Las constantes de inhibición y de afinidad tienen unidades de [g/L], la constante de muerte está en [h-1] y las velocidades específicas de producción en [h-1].

3.2.1. Puntos de equilibrio

El punto de equilibrio se determina a partir del modelo en estado estacionario,

$$\begin{aligned}
0 &= D(x_{1,in} - x_1) - \left[(\mu_{maxx}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sg} + x_1} \right) \left(1 - \frac{x_3}{k_{but}} \right) \left(\frac{1}{Y_{xsg}} \right) \right] \\
&- \left[(\mu_{maxsb}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sbsg} + x_1} \right) \left(\frac{1}{Y_{sbsg}} \right) \right] - \left[(\mu_{maxact}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sgact} + x_1} \right) \left(1 - \frac{x_3}{k_{but}} \right) \left(\frac{1}{Y_{actsg}} \right) \right] \\
&- \left[(\mu_{maxet}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sget} + x_1} \right) \left(\frac{1}{Y_{etsg}} \right) \right] \\
0 &= D(0 - x_2) + \left\{ \left[(\mu_{maxx}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sg} + x_1} \right) \left(1 - \frac{x_3}{k_{but}} \right) \right] - (k_d x_2) \right\} \\
0 &= D(0 - x_3) + \left[(\mu_{maxbut}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sgbut} + x_1} \right) \left(\frac{x_4}{k_{sb} + x_4} \right) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 0 &= D(x_{4,in} - x_4) + \left[(\mu_{maxsb}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sbsg} + x_1} \right) \right. \\
 &\quad \left. - \left[(\mu_{maxbut}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sgbut} + x_1} \right) \left(\frac{x_4}{k_{sb} + x_4} \right) \left(\frac{1}{Y_{butsb}} \right) \right] \right] \\
 0 &= D(0 - x_5) + \left[(\mu_{maxact}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sgact} + x_1} \right) \left(1 - \frac{x_3}{k_{but}} \right) \right] \\
 0 &= D(0 - x_6) + \left[(\mu_{maxace}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sgace} + x_1} \right) \left(\frac{x_5}{k_{aa} + x_5} \right) \right] \\
 0 &= D(0 - x_7) + \left[(\mu_{maxet}x_2) \left(\frac{x_1}{k_{sget} + x_1} \right) \right]
 \end{aligned}$$

El sistema de ecuaciones resultante se resuelve para el vector de estados x por medio de un método de búsqueda de raíces. Usando la función `fsolve` en Matlab, se obtiene el siguiente único punto de equilibrio,

$$\text{Punto de equilibrio} = \begin{bmatrix} 16,5686 \\ 0,9367 \\ 4,2336 \\ 1,7066 \\ 1,5216 \\ 2,0740 \\ 0,2453 \end{bmatrix}$$

3.2.2. Linealización

Al aplicar el método de linealización descrito en el capítulo anterior considerando como variables a manipular la velocidad de dilución D o la concentración de la glucosa de entrada x_{1in} , se obtiene,

Resolviendo el sistema manipulando la tasa de dilución:

$$x = \begin{bmatrix} -0,0144 & -0,3035 & 0,0287 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,0005 & 0 & -0,0033 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,0015 & 0,0452 & -0,01 & 0,0181 & 0 & 0 & 0 \\ -0,0009 & -0,0031 & 0 & -0,02 & 0 & 0 & 0 \\ 0,0004 & 0,0162 & -0,0035 & 0 & -0,01 & 0 & 0 \\ 0,0008 & 0,0221 & 0 & 0 & 0,0004 & -0,01 & 0 \\ 0 & 0,0026 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0,01 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 28,4314 \\ -0,9367 \\ -4,2336 \\ 0,2934 \\ -1,5216 \\ -2,0740 \\ -0,2453 \end{bmatrix} u$$

$$y = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7 \end{bmatrix} + [0]u$$

Resolviendo el sistema manipulando la concentración la concentración de glucosa alimentada:

$$x = \begin{bmatrix} -0,0144 & -0,3035 & 0,0287 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,0005 & 0 & -0,0033 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,0015 & 0,0452 & -0,01 & 0,0181 & 0 & 0 & 0 \\ -0,0009 & -0,0031 & 0 & -0,02 & 0 & 0 & 0 \\ 0,0004 & 0,0162 & -0,0035 & 0 & -0,01 & 0 & 0 \\ 0,0008 & 0,0221 & 0 & 0 & 0,0004 & -0,01 & 0 \\ 0 & 0,0026 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0,01 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1/100 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} u$$

$$y = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7 \end{bmatrix} + [0]u$$

Con estos resultados, podemos proseguir a hacer el análisis de estabilidad y de controlabilidad del sistema, ya que con la linealización ya tenemos los valor de las matrices A,B,C y D de casa caso, manipulando la entrada de glucosa o la tasa de dilución.

3.2.3. Estabilidad

Al evaluar los valores propios de la matriz A resultante se obtiene,

$$\lambda = \begin{bmatrix} -0,01 \\ -0,01 \\ -0,01 \\ -0,0174 \\ -0,0099 \\ -0,0086 + 0,0135i \\ -0,0086 - 0,0135i \end{bmatrix}$$

Con estos valores propios concluimos que el sistema es estable, ya que como se dice en la definición, un sistema es estable si y solo si la parte real de los valores propios es negativa.

3.3. Simulaciones numéricas

Para estudiar el comportamiento dinámico de las variables del proceso se resuelve y analiza el modelo matemático no-lineal.

3.3.1. Programación

Para llevar a cabo la simulación del caso de estudio se utilizó el Software Matlab resolviendo el sistema de ecuaciones con la función ode15s, la cual es una variante del Runge-Kutta (4,5), pero para sistemas rígidos y de paso variable.

Las simulaciones se realizaron a 1000 horas y con condiciones iniciales de 45, 0.25, 0.01, 2, 1.9, 0.01 y 0.01 para la glucosa, biomasa, butanol, butirato, acetato, acetona y etanol respectivamente.

3.3.2. Simulación base

Utilizando valores de $x_{1in} = 45$, $D = 0.01$, y $x_{4in} = 2$, se obtienen los resultados que se muestran en las siguientes figuras:

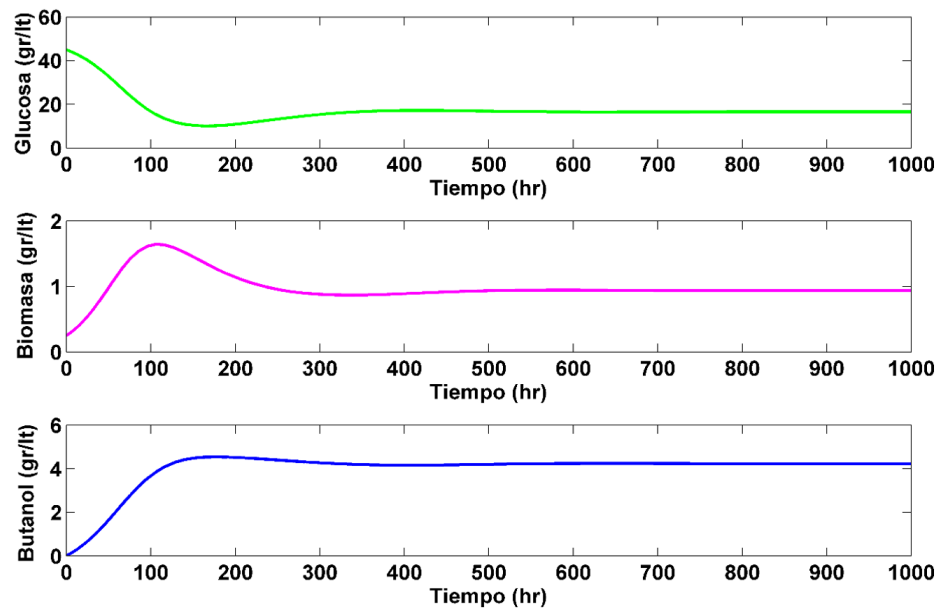


Figura 3.1: Simulación del modelo matemático para la glucosa, biomasa y butanol con $S_g=45$, $D=0.01$ y $S_b=2$.

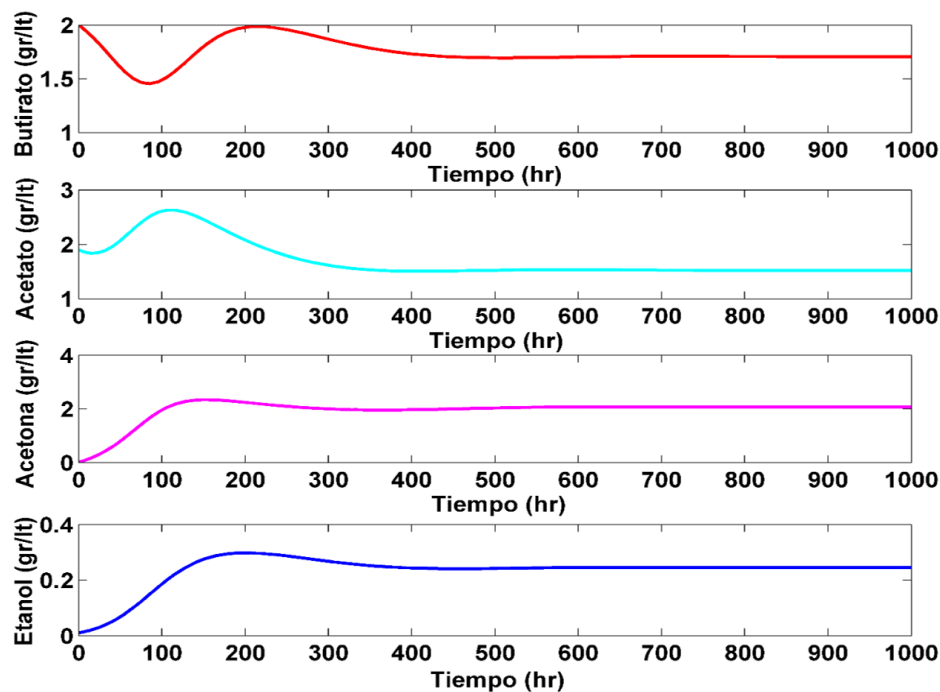


Figura 3.2: Simulación del modelo matemático para el butirato, acetato, acetona y etanol con $S_g=45$, $D=0.01$ y $S_b=2$.

Se puede observar que la glucosa converge a un valor de 16.57 g/L, mientras que la biomasa a 0.9369 g/L, el butanol a 4.233 g/L, el butirato a 1.706 g/L, el acetato a 1.522 g/L, la acetona a 2.074 g/L y el etanol a 0.2453 g/L.

Es decir que con los parámetros utilizados, las condiciones iniciales y los parámetros de alimentación se obtiene 6.5523 g/L de solventes, donde el 65 % es de butanol, 32 % es de acetona y el 3 % de etanol.

Por otro lado, el punto a donde convergen las simulaciones numéricas coincide con el punto de equilibrio determinado en forma numérica y a la propiedad de estabilidad evaluada con el modelo lineal y los valores propios.

3.3.3. Efectos de cambios en D y X_{in}

Para fines de control, se desea controlar la producción de biobutanol en la fermentación ABE, manipulando alguna variable, la cual puede ser la concentración de alimentación de glucosa al reactor, o la tasa de dilución, es decir el flujo de entrada. Así que debido a eso, se realizó un análisis en diferentes escenarios para ver el efecto que cada una de estas variables tiene sobre la producción de biobutanol.

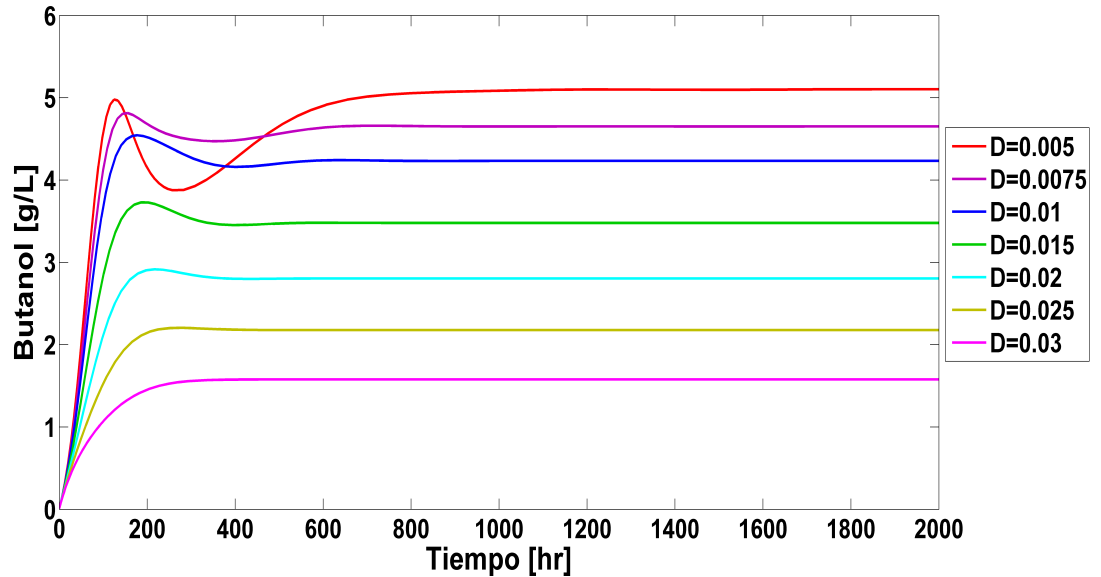


Figura 3.3: Efecto de la tasa de dilución en la producción de butanol con $S_g=45$ y $S_b=2$. La tasa de dilución esta en $[h^{-1}]$.

Con la gráfica anterior (Figura 3.3) podemos ver como a menor tasa de dilución, es mayor la producción de butanol, y esto es debido a que el tiempo de residencia

es inversamente proporcional a este, lo que significa que el tiempo es mayor, sin embargo, a mayor tiempo de residencia el sistema tarda más en estabilizarse, lo cual no es bueno para sistemas de control, porque significa que el tiempo de respuesta será mayor. Igual en la gráfica se puede ver que de manera contraria, a mayor tasa de dilución, la producción de butanol es muy baja porque el tiempo de residencia es tan alto que no permite que se forme más alcohol.

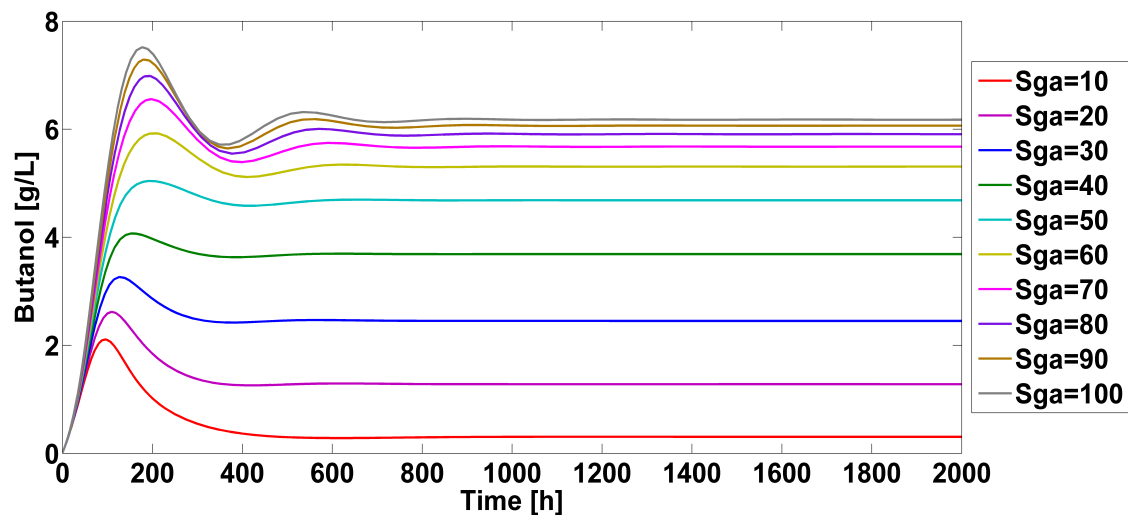


Figura 3.4: Efecto de la alimentación de glucosa en la producción de butanol con $S_b=2$ y $D=0.01$. La alimentación de la glucosa esta en [g/L]

Con la gráfica anterior (Figura 3.4) podemos observar que a mayor concentración de alimentación de glucosa, se produce más butanol, sin embargo a mayor concentración de glucosa el sistema tarda más en estabilizarse. Además hay que tener cuidado con esta concentración debido a que este proceso muestra además una inhibición por sustrato a concentraciones elevadas cercanas a 140 [g/L] [32], así que es mejor manejar una alimentación cercana a los 70 g/L, en la cual ya obtenemos un cantidad de butanol considerable, y además ns mantenemos alejados del límite para la inhibición del microorganismo.

3.3.4. Identificación empírica

Para fines de diseño de control, debido a que no es directo aislar el efecto de la entrada a manipular y la variable a controlar, se propone el uso de modelos simples entrada-salida que se obtienen por identificación empírica.

La siguiente figura (Figura 3.5) muestra el cambio escalón en la entrada de control considerada (Glucosa alimentada) y su efecto en la variable a controlar (Butanol).

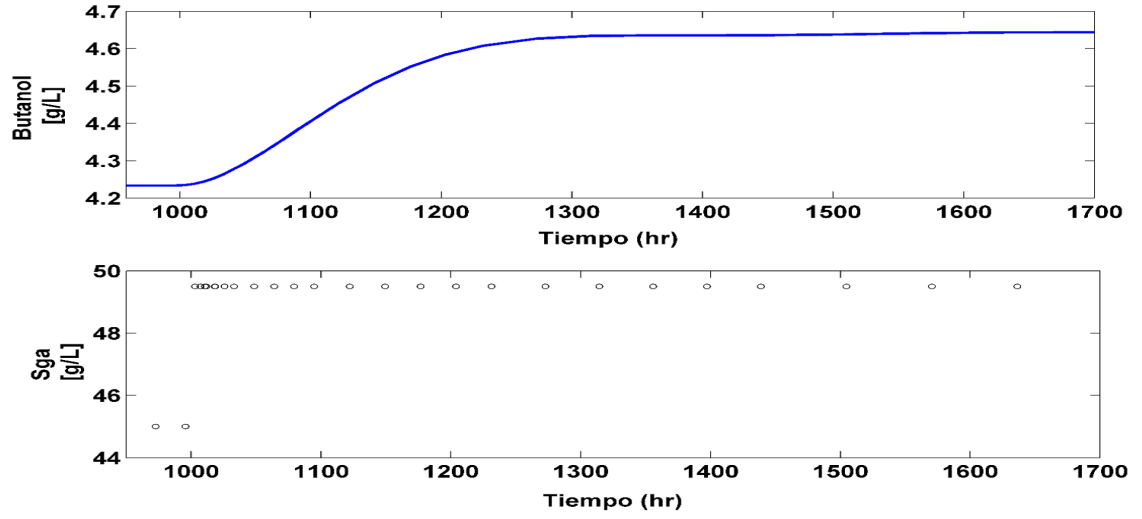


Figura 3.5: Respuesta de paso escalón manipulando Sga

A partir de la respuesta observada en $y(t)$, se selecciona modelo simple de primer orden. Los cálculos de los parámetros son los siguientes:

Modelo de Entrada-Salida de Primer Orden

$$\frac{Y_{(s)}}{U_{(s)}} = \frac{kp}{\tau_0 s + 1} \quad (3.6)$$

Con identificación empírica

$$kp = \frac{Y_2 - Y_1}{U_2 - U_1} = \frac{\Delta Y}{\Delta U}$$

$$kp = \frac{4,603 - 4,234}{49,5 - 45}$$

$$kp = 0,082$$

Para obtener τ_0

$$Y^* = Y_1 + 0,632\Delta Y$$

$$Y^* = 4,234 + 0,632(0,369)$$

$$Y^* = 4,467$$

$$\tau^* = 1140$$

$$\tau_0 = \tau^* - \tau_u$$

$$\tau_0 = 1140 - 1000$$

$$\tau_0 = 140$$

Entonces

$$\frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{0,082}{140s + 1}$$

La siguiente figura (Figura 3.6) muestra el cambio escalón en la entrada de control considerada (Glucosa alimentada) y su efecto en la variable a controlar (Butanol).

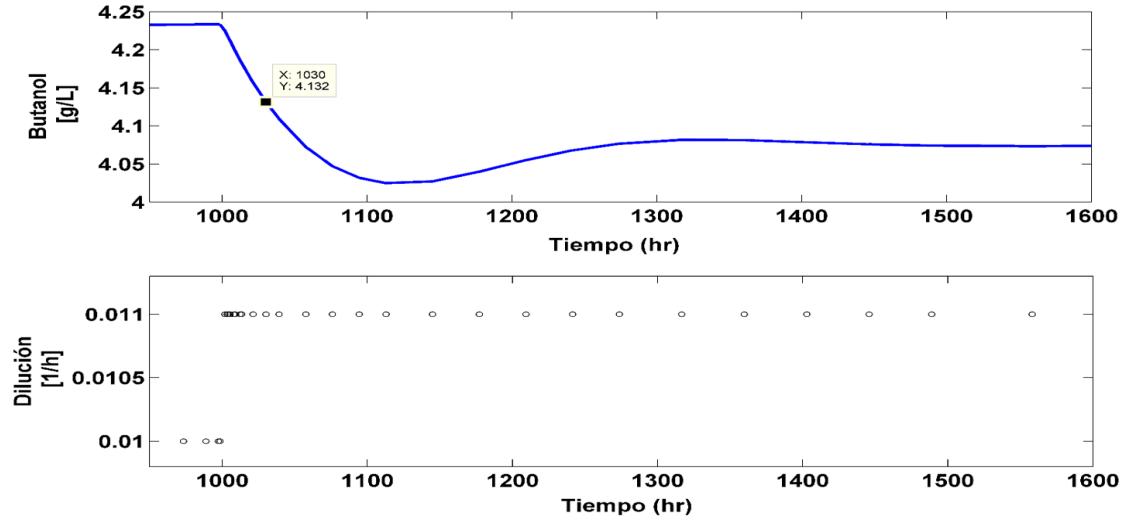


Figura 3.6: Respuesta de paso escalón manipulando D

A partir de la respuesta observada en $y(t)$, se selecciona modelo simple de primer orden. Los cálculos de los parámetros son los siguientes:

Modelo de Entrada-Salida de Primer Orden

$$\frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{kp}{\tau_0 s + 1} \quad (3.7)$$

Con identificación empírica

$$kp = \frac{Y_2 - Y_1}{U_2 - U_1} = \frac{\Delta Y}{\Delta U}$$

$$kp = \frac{4,073 - 4,233}{0,011 - 0,01}$$

$$kp = -160$$

Para obtener τ_0

$$Y^* = Y_1 + 0,632\Delta Y$$

$$Y^* = 4,233 + 0,632(-0,16)$$

$$Y^* = 4,132$$

$$\tau^* = 1030$$

$$\tau_0 = \tau^* - \tau_u$$

$$\tau_0 = 1030 - 1000$$

$$\tau_0 = 30$$

Entonces

$$\frac{Y_{(s)}}{U_{(s)}} = \frac{-160}{30s + 1}$$

Capítulo 4

Control Robusto Basado en Compensación de Error de Modelado y Controlabilidad del Proceso.

En este capítulo se presenta el diseño de control robusto para la producción del butanol en un CSTR con base a un modelo simple entrada-salida. Se presenta además un estudio de la controlabilidad con base al modelo lineal. Además, usando el esquema de control propuesto se evalúa además la controlabilidad del proceso en diferentes regiones de operación en forma numérica. En cada sección se presenta la discusión de resultados.

4.1. Diseño de control robusto.

4.1.1. Problema de control.

Para definir el diseño de controladores es necesario conocer el sistema de control y para eso primero de deben conocer todas las variables en el proceso. En control eso significa, determinar cuáles son las variables de entrada y salida e identificar cuales de ellas van a ser controladas y cuales manipuladas para mantener el proceso en el valor deseado. Además es necesario conocer también las perturbaciones que el proceso pueda tener.

En la figura 4.1 se muestra un sistema de control general para el caso de estudio

antes mencionado. En donde el valor de $Y_{referencia}$ es el valor en el cual queremos mantener el sistema, d son las perturbaciones, las cuales son las variables que no se pueden manipular pero afectan al sistema, y es la variable que queremos controlar y u es la entrada de control.

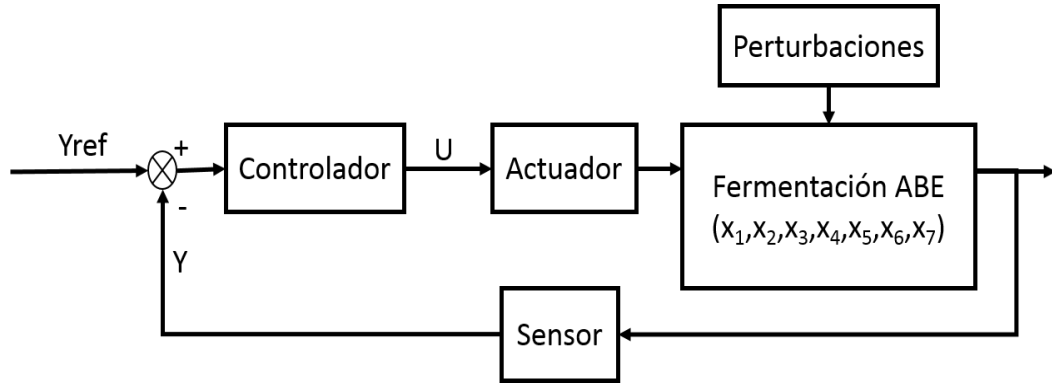


Figura 4.1: Representación general de un sistema de control

En la siguiente figura 4.2 se muestra la clasificación de las variables del sistema. Lo cual significa, cuales variables son manipuladas, controladas y cuales no son controladas.

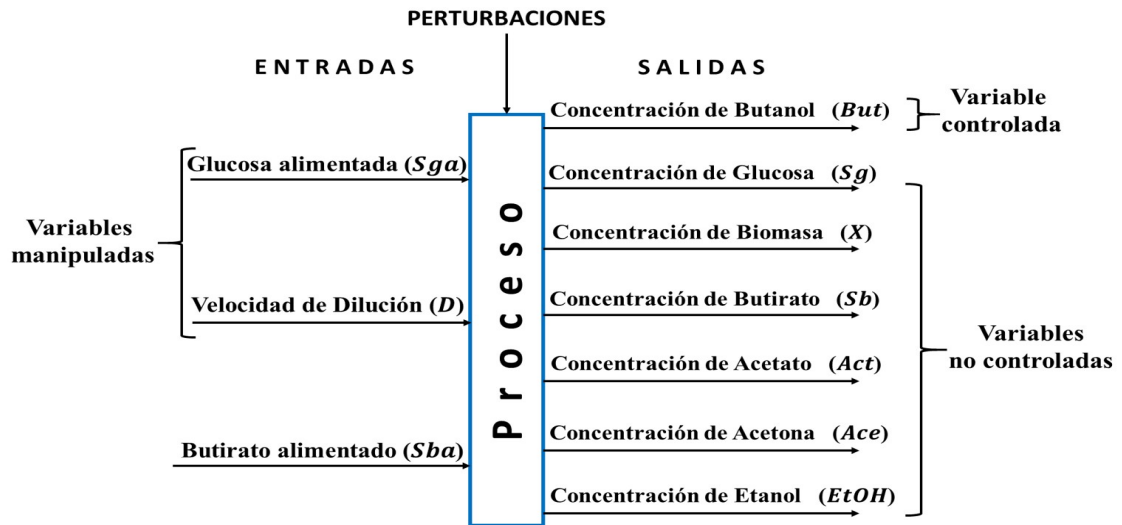


Figura 4.2: Clasificación de las variables involucradas en el proceso

Con base a lo anterior, el problema de control se puede definir como: Regular la concentración de Butanol $y(t) = \text{But}(t) = x_4(t)$ a una referencia deseada y_{ref} manipulando la velocidad de dilución $u(t) = D$, o la glucosa de alimentación $u(t) = x_{1,in}(t)$.

4.1.2. Diseño del control con base a modelos de primer orden.

Para realizar el diseño de control robusto basado en la compensación del error de modelado, se toma en cuenta el modelo entrada-salida obtenido en la identificación empírica.

$$\frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{kp}{\tau_o s + 1} \quad (4.1)$$

En el dominio del tiempo, el modelo de entrada-salida puede escribirse como:

$$[\tau_o s + 1]Y(s) = k_p U(s) \quad (4.2)$$

$$\tau_o s Y(s) + Y(s) = k_p U(s) \quad (4.3)$$

$$\tau_o \frac{dy}{dt} + y = k_p u \quad (4.4)$$

Despejando obtenemos la siguiente expresión:

$$\tau_o \frac{dy}{dt} = k_p u - y \quad (4.5)$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{k_p}{\tau_o} u - \frac{1}{\tau_o} y \quad (4.6)$$

Introduciendo el error:

$$e(t) = y - y_{ref} \quad (4.7)$$

$$\frac{de}{dt} = \frac{dy}{dt} - \frac{dy_{ref}}{dt} \quad (4.8)$$

Sustituyendo queda:

$$\frac{de}{dt} = \frac{k_p}{\tau_o} u - \frac{1}{\tau_o} y - \frac{dy_{ref}}{dt} \quad (4.9)$$

$$\frac{de}{dt} = \frac{k_p}{\tau_o} u - \frac{1}{\tau_o} [e + y_{ref}] - \frac{dy_{ref}}{dt} \quad (4.10)$$

$$\frac{de}{dt} = \frac{k_p}{\tau_o} u - \frac{e}{\tau_o} - \frac{y_{ref}}{\tau_o} - \frac{dy_{ref}}{dt} \quad (4.11)$$

El modelo propuesto está sujeto a las incertidumbres del modelo de esta forma:

$$\frac{de}{dt} = \frac{k_p}{\tau_o} u - \frac{e}{\tau_o} + \eta \quad (4.12)$$

Se introduce un observador de orden reducido para estimar las incertidumbres reales

$$\frac{d\bar{\eta}}{dt} = \frac{1}{\tau_e}(\eta - \bar{\eta}) \quad (4.13)$$

Donde τ_e es la constante del tiempo estimado.

$$\eta = \frac{de}{dt} + \frac{e}{\tau_0} - \frac{k_p}{\tau_0}u \quad (4.14)$$

$$\frac{d\bar{\eta}}{dt} = \frac{1}{\tau_e} \left(\frac{de}{dt} + \frac{e}{\tau_0} - \frac{k_p}{\tau_0}u - \bar{\eta} \right) \quad (4.15)$$

Acomodando:

$$\tau_e \frac{d\bar{\eta}}{dt} = \frac{de}{dt} + \frac{e}{\tau_0} - \frac{k_p}{\tau_0}u - \bar{\eta} \quad (4.16)$$

$$\tau_e \frac{d\bar{\eta}}{dt} - \frac{de}{dt} = \frac{e}{\tau_0} - \frac{k_p}{\tau_0}u - \bar{\eta} \quad (4.17)$$

Introduciendo el observador:

$$w = \tau_e \bar{\eta} - e \quad (4.18)$$

$$\frac{dw}{dt} = \tau_e \frac{d\bar{\eta}}{dt} - \frac{de}{dt} \quad (4.19)$$

$$\bar{\eta} = \frac{1}{\tau_e}(w + e) \quad (4.20)$$

$$\frac{dw}{dt} = \frac{e}{\tau_0} - \frac{k_p}{\tau_0}u - \frac{1}{\tau_e}(w + e) \quad (4.21)$$

Considerando un comportamiento de primer orden a lazo cerrado:

$$\frac{de}{dt} = -\frac{e}{\tau_c} \quad (4.22)$$

Después una retroalimentación inversa está dada por:

$$u = \frac{\tau_0}{k_p} \left(\frac{e}{\tau_0} - \frac{e}{\tau_c} - \bar{\eta} \right) \quad (4.23)$$

$$u = \frac{\tau_0}{k_p} \left[\left(\frac{1}{\tau_0} - \frac{1}{\tau_c} \right) e - \bar{\eta} \right] \quad (4.24)$$

Donde τ_c es la constante del tiempo del lazo cerrado.

$$\tau_0 > \tau_c > \tau_e \quad (4.25)$$

4.1.3. Implementación numérica del controlador.

En esta parte se muestran los resultados del diseño de control mediante la compensación del error de modelado, utilizando el Software Simulink de Matlab, en el cual se desarrolló un digrama de control, utilizando la ecuación de control obtenida en la sección anterior.

En la figura 4.3 se muestra el diagrama en el cual se incluyen los dos controladores, uno para la tasa de dilución y otro para la glucosa alimentada; para activarlos se usan diferentes tiempos. Para correr el programa es necesario determinar las condiciones iniciales, las cuales se alimentan en el espacio de trabajo.

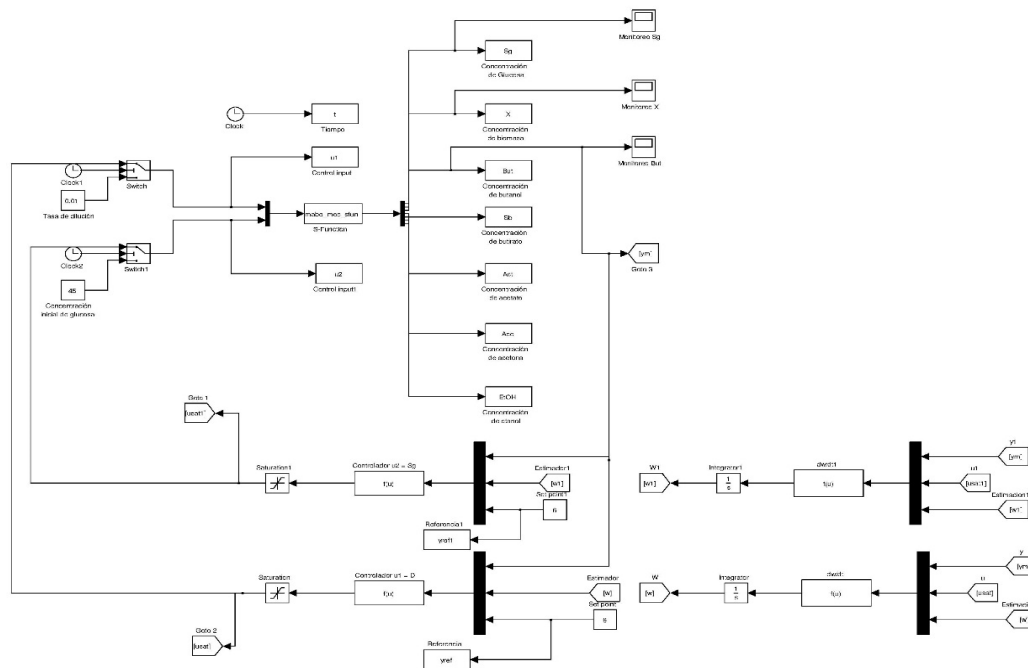


Figura 4.3: Diagrama de control robusto para controlar la producción de butanol en un fermentador ABE manipulando la tasa de dilución o la glucosa alimentada. Simulink, Matlab,

En la gráfica 4.4 se muestra el desempeño de nuestro controlador con una entrada de control Sga:

1. Activación del control en $t=1000$ a una $y_{ref}=6.0$
2. Cambio de referencia $y_{ref}=6$ a $y_{ref}=5.5$ en $t=2000$.
3. Efecto de una perturbación de 10 % en D en $t=3000$

En la Figura 4.4 se observa el comportamiento del controlador para la manipula-

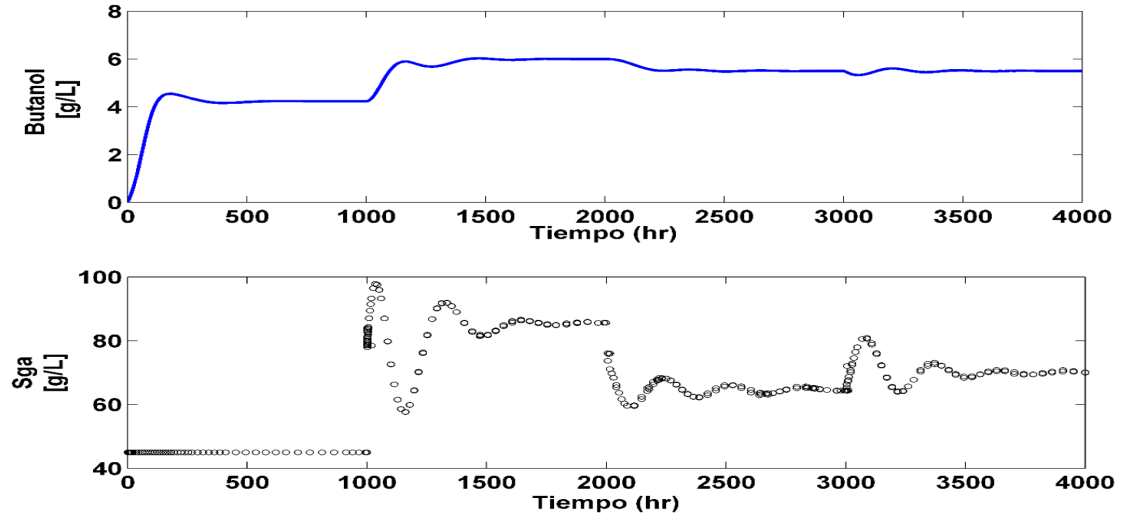


Figura 4.4: Simulación del control de la producción de butanol manipulando la Sga en el modelo

ción de la glucosa de alimentación. Se puede observar que la regulación de Butanol a la referencia deseada de 6 g/L se alcanza en alrededor de 500 horas con un valor aproximado de 85 g/L de glucosa, al aplicar el cambio de referencia a 5.5 g/L el controlador tarda un tiempo muy similar, es decir 500 horas, y un valor de 65 g/L de glucosa. Finalmente, el efecto de la perturbación en la velocidad de dilución sobre el butanol es mínimo y se compensa sin grandes desviaciones en alrededor de 200 horas. Se debe de notar que el tiempo de residencia del reactor es de alrededor de 100 horas (el inverso de D). Entonces, a pesar de que es posible el control del butanol a partir de la glucosa de alimentación, no se considera conveniente por los altos tiempos para alcanzar las referencias deseadas.

En la gráfica 4.6 se muestra el desempeño de nuestro controlador con una entrada de control D :

1. Activación del control en $t=1000$ a una $y_{ref}=5.0$
2. Cambio de referencia $y_{ref}=5$ a $y_{ref}=4.5$ en $t=1800$
3. Efecto de una perturbación de 10% en Sga en $t=2500$

La Figura 4.5 presenta el desempeño del controlador para la manipulación de la velocidad de dilución. En este caso, se observa que el valor deseado de Butanol a la referencia de 5 g/L se alcanza en alrededor de 50 horas con un valor aproximado de $D=0.005$ 1/h. En forma similar, el cambio de referencia es posible en un tiempo equivalente. Finalmente, el efecto de la perturbación en la glucosa de alimentación es mínimo y se compensa con un incremento de la velocidad de dilución. Se debe

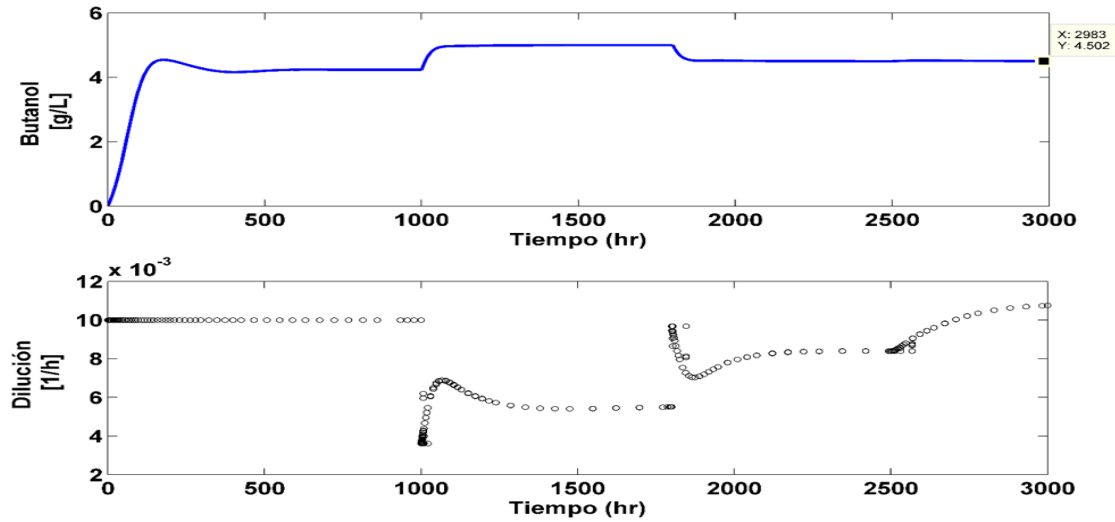


Figura 4.5: Simulación del control de la producción de butanol manipulando la D en el modelo

notar en este caso, que a pesar de que la respuesta a lazo cerrado es muy rápida, la velocidad de dilución no debe tomar valores muy bajo porque implicaría una baja capacidad de procesamiento de la corriente que se alimenta. Por otro lado, se deben de evitar valores muy altos de la dilución por la posibilidad del lavado del reactor.

Con la finalidad de realizar una comparación del control por compensación de error de modelado, se introduce un controlador PI para el caso de manipulación de la velocidad de dilución a una referencia de 5 g/L de Butanol. Se consideran dos métodos de sintonizado del control PI: (i) Ziegler Nichols, y (ii) IMC.

Las dos graficas (Fig 4.6) muestran el desempeño del control PI sintonizado con Ziegler-Nichols. Se puede observar que el controlador alcanza la saturación mínima y hasta 1000 unidades de tiempo posteriores a la activación del control logra alcanzar la referencia. Además, la entrada de control se mantiene haciendo ajustes en todo el rango de la simulación. El desempeño del control PI con sintonizado IMC se observa en las gráficas intermedias. Se puede notar que también se presenta la saturación inferior y la referencia se alcanza hasta 2500 horas después de la activación del controlador. El desempeño del control basado en compensación de error de modelado se desempeña muy bien y logra la referencia deseada en corto tiempo sin un esfuerzo de la entrada de control importante.

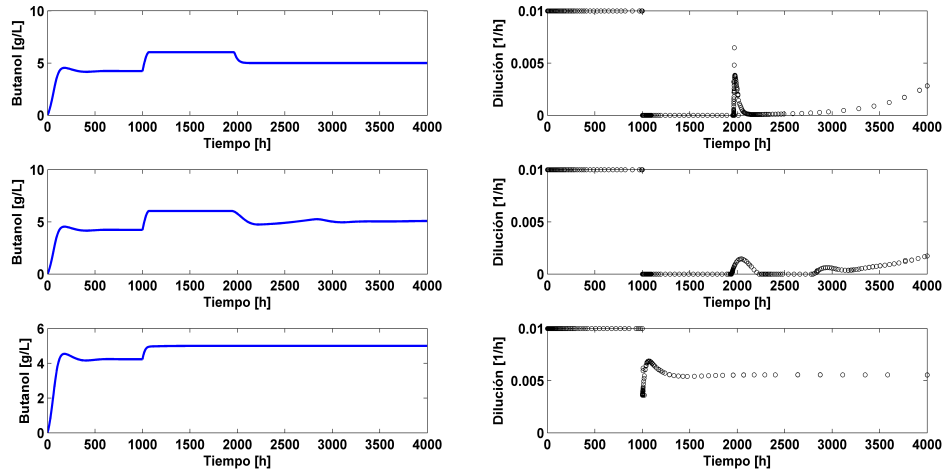


Figura 4.6: Comparación del control por compensación de error de modelado y un control PI.

4.2. Controlabilidad del proceso.

4.2.1. Análisis con base al modelo lineal.

Para evaluar la controlabilidad completa del sistema se calcula la matriz de controlabilidad usando Matlab. Las matrices A y B (manipulando la glucosa alimentada) están dadas por:

$$A = \begin{bmatrix} -0,0144 & -0,3035 & 0,0287 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,0005 & 0 & -0,0033 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,0015 & 0,0452 & -0,01 & 0,0181 & 0 & 0 & 0 \\ -0,0009 & -0,0031 & 0 & -0,02 & 0 & 0 & 0 \\ 0,0004 & 0,0162 & -0,0035 & 0 & -0,01 & 0 & 0 \\ 0,0008 & 0,0221 & 0 & 0 & 0,0004 & -0,01 & 0 \\ 0 & 0,0026 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0,01 \end{bmatrix} \quad (4.26)$$

$$B = \begin{bmatrix} 28,4314 \\ -0,9367 \\ -4,2336 \\ 0,2934 \\ -1,5216 \\ -2,0740 \\ -0,2453 \end{bmatrix} \quad (4.27)$$

La matriz de controlabilidad es,

$$C = \begin{bmatrix} 28,4314 & -0,24662803 & -0,00362688 & 0,00013503 & -1,61E-06 & -1,76E-09 & 3,49E-10 \\ -0,9367 & 0,02818658 & -0,00028156 & -1,51E-06 & 8,23E-08 & -8,03E-10 & -1,01E-11 \\ -4,2336 & 0,0479548 & -9,23E-05 & -4,47E-06 & -1,49E-09 & 2,81E-09 & -7,52E-11 \\ 0,2934 & -0,02855249 & 0,00070564 & -9,98E-06 & 8,27E-08 & -4,55E-10 & 1,32E-11 \\ -1,5216 & 0,02623162 & -7,22E-05 & -4,97E-06 & 9,49E-08 & -2,57E-10 & -2,10E-11 \\ -2,074 & 0,02217541 & 0,00021436 & -1,13E-05 & 1,86E-07 & -1,29E-09 & -6,32E-12 \\ -0,2453 & 1,76E-05 & 7,31E-05 & -1,46E-06 & 1,07E-08 & 1,07E-10 & -3,15E-12 \end{bmatrix} \quad (4.28)$$

El rango de C es 5, lo que significa que no es de rango completo y por lo tanto no es posible influir en todos los estados del proceso con la entrada de control seleccionada. Es importante tomar en cuenta que un sistema puede ser o no controlable, sin embargo, aunque el sistema de como resultado no controlable, existen mtodos para fraccionar esa parte en una parte controlada y otra no.

En decir, si en nuestro sistema de fermentación ABE el sistema es no controlable, significa que con las 7 variables del sistema no podemos controlar la producción de butanol, pero puede ser que con 1, 2 o la mitad si se pueda.

En particular, si el rango de $C = q$ jn, entonces hay una matriz P no singular n x n tal que se puede hacer la siguiente partición,

$$\hat{A} = P^{-1}AP = \begin{bmatrix} \hat{A}_{11} & \hat{A}_{12} \\ 0 & \hat{A}_{22} \end{bmatrix} \quad (4.29)$$

$$\hat{B} = P^{-1}B = \begin{bmatrix} \hat{B}_1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

Donde \hat{A}_{11} es q x q, \hat{B}_1 es q x m y el par $(\hat{A}_{11}, \hat{B}_1)$ es controlable.

Así, para un sistema que no es completamente controlable, para encontrar la región controlable es necesario encontrar la matriz P,

$$P = [X \ Y]$$

Donde X es una matriz n x q con columnas linealmente independientes de C (o algunas columnas q que forman la base de R(C)) y Y es una matriz n x (n-q) cuyas columnas son escogidas tal que P es no singular, así que todas las columnas de P son linealmente independientes. En este caso X debe ser una matriz 7 x 5 y Y una matriz de tamaño 7 x 2.

La partición de P^{-1} es:

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} M \\ N \end{bmatrix} \quad (4.31)$$

Donde M es $q \times n$ y N es $(n-q) \times n$, osea que M es de tamaño 5×7 y N 2×7 .

$$P^{-1}P = I_n \quad (4.32)$$

$$\begin{bmatrix} M \\ N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X & Y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} MX & MY \\ NX & NY \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_q & 0 \\ 0 & I_{n-q} \end{bmatrix} \quad (4.33)$$

$$NX = 0 \rightarrow R(C) \subset N(N) \rightarrow NB = 0 \text{ y } NAX = 0 \quad (4.34)$$

$$\hat{A} = P^{-1}AP = \begin{bmatrix} M \\ N \end{bmatrix} A \begin{bmatrix} X & Y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} MAX & MAY \\ NAX & NAY \end{bmatrix} \quad (4.35)$$

$$\hat{B} = P^{-1}B = \begin{bmatrix} M \\ N \end{bmatrix} B = \begin{bmatrix} MB \\ NB \end{bmatrix} \quad (4.36)$$

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} \hat{A}_{11} & \hat{A}_{12} \\ 0 & \hat{A}_{22} \end{bmatrix} \quad (4.37)$$

$$\hat{B} = \begin{bmatrix} \hat{B}_1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.38)$$

$$\hat{C} = \begin{bmatrix} \hat{B} & \hat{A}\hat{B} & \dots & \hat{A}^{n-1}\hat{B} \end{bmatrix} = P^{-1}C \quad (4.39)$$

El rango de C es igual al rango de $\hat{C}=q$, es decir 5.

$$\hat{C} = \begin{bmatrix} \hat{B}_1 & \hat{A}_{11}\hat{B}_1 & \dots & \hat{A}_{11}^{q-1}\hat{B}_1 & \dots & \hat{A}_{11}^{n-1}\hat{B}_1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad (4.40)$$

Usando el teorema de Cayley-Hamilton,

$$Rango \hat{C} = rango \begin{bmatrix} \hat{B}_1 & \hat{A}_{11}\hat{B}_1 & \dots & \hat{A}_{11}^{q-1}\hat{B}_1 \end{bmatrix} = q = 5 \quad (4.41)$$

Donde $(\hat{A}_{11}, \hat{B}_1)$ es controlable.

El cambio de variables

$$x = Pz = P \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} \quad (4.42)$$

Entonces el sistema se transforma en el sistema:

$$\dot{z}_1 = \hat{A}_{11}z_1 + \hat{A}_{12}z_2 + \hat{B}_1u \quad (4.43)$$

$$\dot{z}_2 = \hat{A}_{22}z_2 \quad (4.44)$$

Claramente el estado z_2 no es controlable al no estar afectado por la entrada de control,

$$z_2(0) = 0 \rightarrow z_2(t) = 0 \quad (4.45)$$

$$\dot{z}_1 = \hat{A}_{11}z_1 + \hat{B}_1u \quad (4.46)$$

El estado z_1 es controlable porque el par $(\hat{A}_{11}, \hat{B}_1)$ es controlable.

Con este ejercicio podríamos tener la parte controlada del proceso y la parte no controlada, sin embargo al realizar la partición perdemos físicamente lo que representa esto, ya que al agregar columnas para lograr tener una matriz de rango completo, ya no podemos identificar que variables se pierden en ese paso, es decir, al final tendríamos una matriz controlable y otra no, pero no podríamos concluir que variables si pueden controlarse y cuales no.

Es por eso que se decidió realizar un análisis numérico para comprobar que el sistema puede ser controlado.

4.3. Análisis numérico con base al modelo no-lineal.

Una alternativa al análisis presentado en la sección anterior es el análisis de controlabilidad numérico que se presenta en el Capítulo 2. Las siguientes simulaciones numéricas presentan la implementación del control propuesto para el control de butanol en diferentes regiones del proceso, incluyendo las derivadas de los estados no-controlados.

Con la imagen anterior podemos ver como a diferentes niveles de glucosa (85, 50 y 25 g/L), la concentración de butanol puede alcanzar diferentes valores y las derivadas de las demás variables alcanzan el cero, concluyendose que nuestro sistema es estable

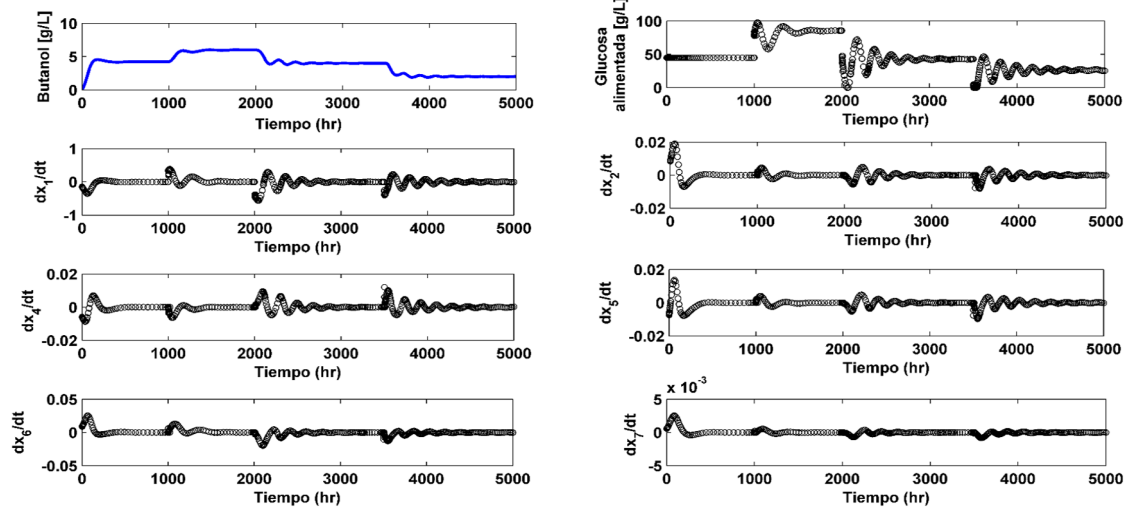


Figura 4.7: Derivadas de los estados no controlados manipulando Sga

al no tener cambios de las variables que no son controladas. Esto significa que en el sistema es posible controlar la producción de butanol solo manipulando una variable, como este caso, la glucosa alimentada.

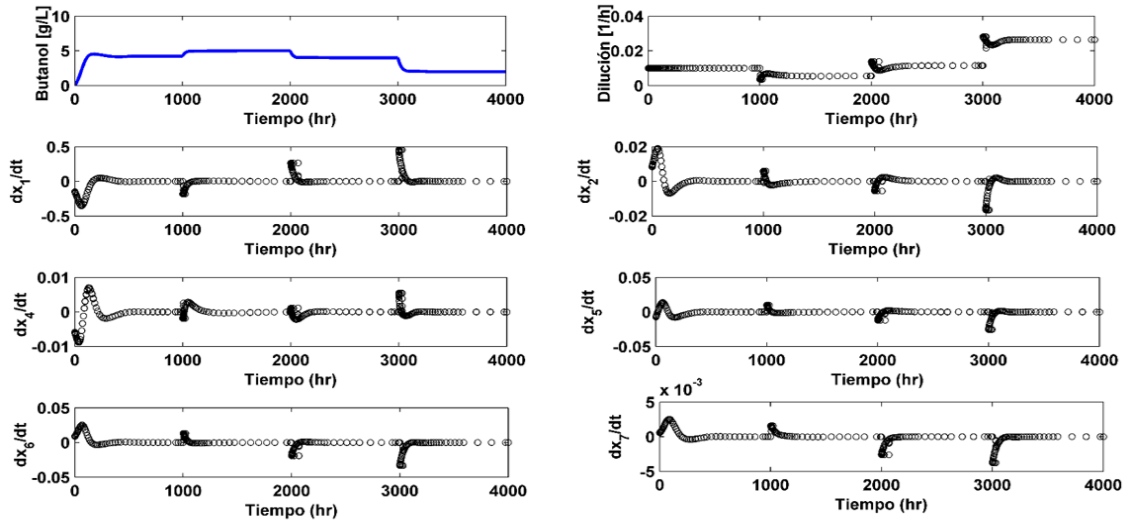


Figura 4.8: Derivadas de los estados no controlados manipulando D

Con la imagen anterior podemos ver como a diferentes niveles de la tasa de dilución (0.02, 0.01 y 0.05 hr⁻¹), la concentración de butanol puede alcanzar diferentes valores y las derivadas de las demás variables alcanzan el cero, concluyéndose que nuestro sistema es estable al no tener cambios de las variables que no son controladas. Esto significa que en el sistema es posible controlar la producción de butanol solo

manipulando una variable, como este caso, la tasa de dilución.

Capítulo 5

Conclusiones y Trabajo futuro

5.1. Conclusiones

Derivado del estudio que se presenta en este trabajo, se establecen las siguientes conclusiones:

- La operación convencional de la producción de butanol a través de la fermentación ABE en procesos continuos requiere la implementación de esquemas de control con la finalidad de minimizar el efecto de perturbaciones (inhibición del desempeño de los microorganismos, cambios de condiciones de diseño).
- El modelo de la producción de butanol a través de la fermentación ABE en reactores continuos de tanque agitado presenta importantes incertidumbres, lo que dificulta que técnicas de control convencionales o basadas en modelo exacto se desempeñen en forma apropiada.
- El diseño e implementación de control robusto por técnicas de compensación de error de modelado conduce a un control simple con buenas propiedades de desempeño y robustez para el control de la producción continua de butanol en reactores continuos de tanque agitado.
- La manipulación de la velocidad de dilución permite la regulación del butanol en forma rápida, pero con limitantes en alcanzar valores más altos de la concentración de butanol al manipular la glucosa de alimentación.
- La manipulación de la glucosa de alimentación permite también el control del butanol, pero su dinámica a lazo cerrado es muy lenta.

- A pesar de la variabilidad del proceso en diferentes regiones de operación, la concentración de butanol es controlable.

5.2. Trabajo futuro

Algunas líneas de investigación que se pueden abordar relacionadas al control de la producción continua de Butanol en reactores continuos de tanque agitado son:

- Desarrollar un prototipo experimental de la producción de butanol por la fermentación ABE e implementar la técnica de control propuesta.
- Diseñar controladores robustos con técnicas basadas en modos deslizantes o de modo predictivo y comparar con los resultados presentados en este trabajo.
- Estudiar el problema de estimación de estados no medibles para incluir estados estimados del butanol en el diseño e implementación del controlador.

Bibliografía

- [1] R. Aguilar-López y J. Alvarez-Ramírez. Sliding-mode control scheme for a class of continuous chemical reactors. *IEE Proceedings- Control Theory and Applications*, 149(4):263–268, 2002.
- [2] N. K. N. Al-Shorgani, M. S. Kalil, W. M. W. Yusoff, y A. A. Hamid. Biobutanol production by a new aerotolerant strain of clostridium acetobutylicum yml under aerobic conditions. *Fuel*, 158:855–863, 2015.
- [3] S. B. Bankar, S. A. Survase, H. Ojamo, y T. Granström. Biobutanol: the outlook of an academic and industrialist. *RSC Advances*, 3(47):24734–24757, 2013.
- [4] C. S. Bildea y A. A. Kiss. Dynamics and control of a biodiesel process by reactive absorption. *Chemical engineering research and design*, 89(2):187–196, 2011.
- [5] A. S. R. Brsio, A. Romanenko, J. Leal, L. O. Santos, y N. C. P. Fernandes. Nonlinear model predictive control of biodiesel production via transesterification of used vegetable oils. *Journal of Process Control*, 23(10):1471–1479, 2013.
- [6] R. Datta y J.G. Zeikus. Modulation of acetone-butanol-ethanol fermentation by carbon monoxide and organic acids. *Applied and Environmental Microbiology*, 49(3):522–529, 1985.
- [7] A. Demirbas. *Biofuels securing the planets future energy needs*. Elsevier, 2009.
- [8] M. H. Eom, B. Kim, H. Jang, S. H. Lee, W. Kim, Y. A. Shin, y J. H. Lee. Dynamic modeling of a fermentation process with ex situ butanol recovery (esbr) for continuous biobutanol production. *Energy and Fuels*, 29(11):7254–7265, 2015.
- [9] T. C. Ezeji, N. Qureshi, y H. P. Blaschek. Butanol fermentation research: Upstream and downstream manipulations. *The Chemical Record*, 4(5):305–314, 2004.

- [10] T. C. Ezeji, N. Qureshi, y H.P. Blaschek. Bioproduction of butanol from biomass: from genes to bioreactors. *Current opinion in biotechnology*, 18(3):220–227, 2007.
- [11] R. Franke, D. Selent, y A. Brner. Applied hydroformylation. *Chemical Reviews*, 112(11):5675–5732, 2012.
- [12] C. A. García, A. G. Fuentes, A. D Hennecke, E. Riegelhaupt, F. Manzini, y O. Masera. Life-cycle greenhouse gas emissions and energy balances of sugarcane ethanol production in mexico. *Applied Energy*, 88(6):2088–2097, 2011.
- [13] V. García, J. .Pkkil, H. Ojamo, y R. L . Muurinen, E.and Keiski. Challenges in biobutanol production: How to improve the efficiency?. *Renewable and sustainable energy reviews*, 15(2):964–980, 2011.
- [14] S. M. Harde, S. B. Jadha, H. Bankar, S. B.and Ojamo, T. Granstrm, R. S. Singhal, y S. A. Survase. Acetone-butanol-ethanol (abe) fermentation using the root hydrolysate after extraction of forskolin from coleus forskohlii. *Renewable Energy*, 86:594–601, 2016.
- [15] M. F. Ibrahim, S. Abd-Aziz, M. E. M. Yusoff, L. Y. Phang, y M. A. Hassan. Simultaneous enzymatic saccharification and abe fermentation using pretreated oil palm empty fruit bunch as substrate to produce butanol and hydrogen as biofuel. *Renewable Energy*, 77:447–455, 2015.
- [16] R. M. Ignat y A. A. Kiss. Optimal design, dynamics and control of a reactive dwc for biodiesel production. *Chemical Engineering Research and Design*, 91(9):1760–1767, 2013.
- [17] Y. S. Jang, A. Malaviya, C. Cho, J. Lee, y S. Y. Lee. Butanol production from renewable biomass by clostridia. *Bioresource Technology*, 123:653–663, 2012.
- [18] K. A. K. Khler, J. Rohl, L. M. Blank, y A. Schmid. Integration of biocatalyst and process engineering for sustainable and efficient n-butanol production. *Engineering in Life Sciences*, 15(1):4–19, 2015.
- [19] E. P. Knoshaug y M. Zhang. Butanol tolerance in a selection of microorganismsl. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, 153(1-3):13–20, 2009.

- [20] A. Kujawska, J. Kujawski, M. Bryjak, y W. Kujawski. Abe fermentation products recovery methods - a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 48:648–661, 2015.
- [21] M. Kumar y K. Gayen. Developments in biobutanol production: new insights. *Applied Energy*, 88(6):1999–2012, 2011.
- [22] A. P. Mariano, C. B. B. Costa, M. R. W. Maciel, F. M. Filho, D. I. P. Atala, D. D. F. De Angelis, y R. M. Filho. Dynamics and control strategies for a butanol fermentation process. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, 160(8):2424–2448, 2010.
- [23] R. Mayank, A. Ranjan, y V. S. Moholkar. Mathematical models of abe fermentation: review and analysis. *Critical reviews in biotechnology*, 33(4):419–447, 2013.
- [24] T. Millat y K. Winzer. Mathematical modelling of clostridil acetone-butanol-ethanol fermentation. *Applied Microbiology and Biotechnology*, 101(6):2251, 2017.
- [25] F. S. Mjalli y M. A. Hussain. Approximate predictive versus self-tuning adaptive control strategies of biodiesel reactors. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 48(24):11034–11047, 2009.
- [26] F. S. Mjalli, L. Kim San, K. Chai Yin, y M. Azlan Hussain. Dynamics and control of a biodiesel transesterification reactor. *Chemical Engineering and Technology*, 32(1):13–26, 2009.
- [27] S. Ochoa, G. Wozny, y J. U. Repke. Plantwide optimizing control of a continuous bioethanol production process. *Journal of Process Control*, 20(9):983–998, 2010.
- [28] K. Ogata. *Ingenieria de Control Moderna*. Prentice Hall, 2014.
- [29] P. H. Pfromm, V. Amanor-Boadu, R. Nelson, P. Vadlani, y R. Madl. Bio-butanol vs. bio-ethanol: A technical and economic assessment for corn and switchgrass fermented by yeast or clostridium acetobutylicum. *Biomass and Bioenergy*, 34(4):515–524, 2010.
- [30] A. Procentese, F. Raganati, G. Olivieri, M. E. Russo, P. Salatino, y A. Marzocchella. Continuous xylose fermentation by clostridium acetobutylicum - assessment of solventogenic kinetics. *Bioresource Technology*, 192:142–148, 2015.

- [31] N.H.F. Puebla. *Simulación y control de procesos*. Universidad Autónoma Metropolitana, Azcapotzalco, 2010.
- [32] N. Qureshi, B. C. Saha, y M. A Cotta. Butanol production from wheat straw hydrolysate using clostridium beijerinckii. *Bioprocess and Biosystems Engineering*, 30(6):419–427, 2007.
- [33] F. Raganati, G. Olivieri, A. Procentese, M. E. Russo, P. Salatino, y A. Marzocchella. Butanol production by bioconversion of cheese whey in a continuous packed bed reactor. *Bioresource Technology*, 138:259–265, 2013.
- [34] E. Rajchenberg-Ceceña, J.A. Rodríguez-Ruiz, L.K. Juárez, J.A. Martínez, y A.S. Morales. Producción microbiológica de butanol. *BioTecnología*, 13:26–37, 2009.
- [35] K. Y. Rani y V. S. R Rao. Control of fermenters - a review. *Bioprocess Engineering*, 21(1):77–88, 1999.
- [36] A.C.D Rojas y G.N.C. Gonzlez. Diseño conceptual de un fermentador para la producción de n-butanol a partir de glucosa empleando clostridium acetobutylicum atcc 824. págs. 1–63. Universidad Industrial de Santander, 2011.
- [37] H. Shinto, Y. Tashiro, M. Yamashita, G. Kobayashi, T. Sekiguchi, T. Hanai, Y. Kuriya, M. Okamoto, y K. Sonomoto. Kinetic modeling and sensitivity analysis of acetone-butanol-ethanol production. *Journal of Biotechnology*, 131(1):45–56, 2007.
- [38] E. Sklavounos, M. Iakovlev, S. Survase, T. Granstrm, y A. van Heiningen. Oil palm empty fruit bunch to biofuels and chemicals via so2-ethanol-water fractionation and abe fermentation. *Bioresource Technology*, 147:102–109, 2013.
- [39] C. A. Smith y A. B. Corripio. *Control Automtico de Procesos*. Limusa, 1991.
- [40] K. Uyeda y J. C. Rabinowitz. Pyruvate-ferredoxin oxidoreductase. iv. studies on the reaction mechanism. *Journal of Biological Chemistry*, 246(10):3120–3125, 1971.
- [41] W. Van Hecke, P. Vandezande, S. Claes, S. Vangeel, H. Beckers, L. Diels, y H. De Wever. Integrated bioprocess for long-term continuous cultivation of clostridium acetobutylicum coupled to pervaporation with pdms composite membranes. *Bioresource Technology*, 111:368–377, 2012.

- [42] H. I. Velázquez-Sánchez. Construcción y evaluación de modelos cinéticos para la producción de biocombustibles derivados del metabolismo de *Clostridium beijerinckii*. págs. 1–69. CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS AVANZADOS DEL INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL, 2014.
- [43] H. I. Velázquez-Sánchez, G. Lara-Cisneros, R. Femat, y R. Aguilar-López. Dynamic nonlinear feedback control applied to improve butanol production by *Clostridium acetobutylicum*. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 2017.
- [44] H. I. Velázquez-Sánchez, H. Puebla, y R. Aguilar-López. Novel feedback control to improve biohydrogen production by *Desulfovibrio alaskensis*. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 14(6):1255–1264, 2016.
- [45] Chang W.L. Acetone-butanol-ethanol fermentation by engineered *Clostridium beijerinckii* and *Clostridium tyrobutyricum*. págs. 1–233. The Ohio State University, 2010.
- [46] O. Wolkenhauer. Why model? *Frontiers in Physiology*, 5:1–5, 2014.
- [47] C. Xue, J. Zhao, C. Lu, S. T. Yang, F. Bai, y I. C. Tang. High-titer n-butanol production by *Clostridium acetobutylicum* JB200 in fed-batch fermentation with intermittent gas stripping. *Biotechnology and Bioengineering*, 109(11):2746–2756, 2012.
- [48] Lee S. Y., Park J. H., Jang S. H., Nielsen L. K., Kim J., y Jung K. S. Fermentative butanol production by clostridia. *Biotechnology and Bioengineering*, 101(2):209–228, 2008.
- [49] X. Yang y G. T. Tsao. Mathematical modeling of inhibition kinetics in acetone-butanol fermentation by *Clostridium acetobutylicum*. *Biotechnology Progress*, 10(5):532–538, 1994.